



Modélisation et simulation multi-échelles de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée

G. Blanchard

► To cite this version:

G. Blanchard. Modélisation et simulation multi-échelles de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée. Modélisation et simulation. Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), 2014. Français. NNT: . tel-01171809

HAL Id: tel-01171809

<https://hal.science/tel-01171809>

Submitted on 6 Jul 2015

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE)*

Spécialité :

Dynamique des fluides

Présentée et soutenue le 28/11/2014 par :

GHISLAIN BLANCHARD

**Modélisation et simulation multi-échelles de l'atomisation
d'une nappe liquide cisailée.**

JURY

ALAIN BERLEMONT
JEAN-PAUL VILA
PHILIPPE VILLEDIEU
STÉPHANE VINCENT
STÉPHANE ZALESKI
DAVIDE ZUZIO

Professeur
Professeur
Professeur
Professeur
Professeur
Docteur

Rapporteur
Examinateur
Directeur de thèse
Rapporteur
Président du jury
Encadrant

École doctorale :

Mécanique, Énergétique, Génie civil et Procédés (MEGEP)

Unité de Recherche :

ONERA Toulouse, Département Modèles pour l'Aérodynamique et l'Énergétique

Directeur de Thèse :

Philippe Villedieu

Remerciements

Je tiens tout d’abord à remercier chaleureusement Philippe Villedieu et Davide Zuzio pour la confiance qu’ils m’ont accordé en acceptant de diriger mes travaux de thèse. Durant ces trois années, ils ont su m’encourager et me guider tout en me laissant une grande liberté. Ce fut un réel plaisir d’apprendre à leurs côtés et je leur en suis profondément reconnaissant.

Mes remerciements vont également à l’ensemble des membres du jury pour l’intérêt qu’ils ont porté à mes travaux. Je remercie les deux rapporteurs, le professeur Alain Berlemont et le professeur Stéphane Vincent, qui ont accepté de relire et d’évaluer l’ensemble du manuscrit et dont les suggestions enrichiront mes futurs travaux. Je remercie également le professeur Stéphane Zaleski pour m’avoir fait l’honneur de présider le jury et le professeur Jean-Paul Vila pour avoir accepté d’examiner mon travail.

Je souhaite également remercier Pierre Millan, directeur du Département Modèles pour l’Aéronautique et l’Énergétique (DMAE), pour m’avoir accueilli au sein du département dans des conditions propices à la réussite. Mes remerciements vont également à Grégoire Casalis, adjoint au directeur du DMAE, ainsi qu’à Corinne Plantade et Valérie Duplessis, secrétaires au DMAE, pour leurs implications dans le bon déroulement de ma thèse au sein du département.

Ces trois dernières années de thèse ont aussi été pour moi l’opportunité de côtoyer et de travailler au côté de l’ensemble des membres du DMAE dans une atmosphère conviviale et agréable. Ceux-ci ont tous de près ou de loin contribué au succès de cette thèse et je tiens donc à les en remercier. Je souhaite en particulier saluer les thésards, les postdocs et les stagiaires que j’ai eu le plaisir de rencontrer au fil des années. Même si nombre d’entre eux sont devenus des amis, je ne me risquerais pas à les nommer de peur d’en oublier. Sachez que je garderai un très bon souvenir de mon passage à l’Onera grâce à vous et j’espère que certaines traditions perdureront !

Pour finir, je souhaite remercier ma famille qui m’a toujours soutenu et encouragé au cours de toutes ces années d’étude. Si j’en suis arrivé là, c’est aussi grâce à eux ! Enfin, je souhaite adresser mes derniers remerciements à ma compagne, Laure, qui m’a toujours soutenu et supporté pendant cette aventure.

Table des matières

Introduction générale	17
1 État de l’art	21
1.1 Principes de l’atomisation assistée	21
1.1.1 Définition générale de l’atomisation	21
1.1.2 Description de l’atomisation d’une nappe liquide cisailée	22
1.2 Les principaux types d’injecteurs	25
1.2.1 Les injecteurs pressurisés	25
1.2.2 Les injecteurs <i>airblast</i>	25
1.3 État de l’art de la simulation numérique de l’atomisation primaire	26
1.3.1 Les approches <i>DNS</i>	26
1.3.2 Approches dites « phénoménologiques »	30
1.4 Approche retenue pour la modélisation de l’atomisation assistée	32
2 Modèle bifluide pour la description du cœur liquide	35
2.1 Formulation du modèle	36
2.1.1 Hypothèses de modélisation	36
2.1.2 Équations générales	37
2.1.3 Modélisation des effets capillaires	41
2.1.4 Formulation finale du modèle	42
2.2 Discrétisation du modèle	42
2.2.1 Notations	42
2.2.2 Méthode de calcul des gradients discrets	43
2.2.3 Expression générale du schéma de discrétisation	48
2.2.4 Discrétisation des flux liés à la partie hyperbolique des équations	50
2.2.5 Discrétisation du tenseur capillaire	52
2.2.6 Discrétisation du tenseur visqueux	52
2.2.7 Discrétisation du terme de gravité	53
2.2.8 Extension du schéma Bas-Mach à l’ordre 2 en espace	53
2.2.9 Résolution numérique du système discret	67
2.3 Conclusion du chapitre	70
3 Modèle de spray pour la description du brouillard de gouttes	73
3.1 Modélisation continue d’un spray à l’aide d’une équation cinétique	73
3.1.1 Hypothèses du modèle	73
3.1.2 Notations	74
3.1.3 Équations générales du spray	74
3.1.4 Couplage de l’écoulement porteur avec le spray	76
3.2 Discrétisation numérique	77

3.2.1	Discrétisation de l'espace des phases par une méthode particulaire . .	77
3.2.2	Discrétisation temporelle	78
3.2.3	Interpolation des propriétés du fluide porteur.	80
3.2.4	Conditions aux limites pour les particules numériques	81
3.2.5	Conditions d'injection des particules numériques	81
3.3	Conclusion du chapitre	82
4	Développements réalisés dans le code SLOSH	83
4.1	Liste des principaux développements	83
4.2	Le calcul massivement parallèle	84
4.2.1	Description de l'architecture des super-calculateurs ciblés.	85
4.2.2	Le standard MPI en quelques mots	85
4.2.3	Évaluation des performances d'un programme parallèle	88
4.3	Parallélisation du code SLOSH en utilisant une méthode de décomposition de domaine	89
4.3.1	La méthode de décomposition de domaine	89
4.3.2	Mise en œuvre dans le code SLOSH	90
4.3.3	Évaluation des performances du code SLOSH	95
4.4	Conclusion du chapitre	96
5	Validations	99
5.1	Validation du solveur à phases séparées	99
5.1.1	Oscillation amortie d'une onde de surface	99
5.1.2	Instabilité de type Rayleigh-Taylor	101
5.1.3	Collisions binaires de gouttes	110
5.2	Validation du solveur spray	112
5.2.1	Validation du couplage pour la quantité de mouvement	112
5.2.2	Perte de charge dans un écoulement chargé en particules	114
5.3	Conclusion du chapitre	116
6	Méthodologie de couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray	119
6.1	Principe de la méthode de couplage	119
6.2	Notations	121
6.3	Vue d'ensemble du système d'équations couplées	121
6.4	Modèle d'atomisation	123
6.4.1	Formulation continue	123
6.5	Modèle de ré-impact de gouttes	130
6.5.1	Les principales difficultés	131
6.5.2	Formulation continue	131
6.6	Discrétisation et implémentation numérique dans le code SLOSH	139
6.6.1	Algorithme de couplage	139
6.6.2	Discrétisation du modèle d'atomisation	139
6.6.3	Discrétisation du modèle de ré-impact	142
6.7	Cas de validation pour le modèle de ré-impact	146
6.7.1	Configuration	146
6.7.2	Résultats	147
6.8	Conclusion du chapitre	148

7	Application à la simulation de l'atomisation assistée d'une nappe liquide plane	153
7.1	Description de la configuration expérimentale de référence	154
7.1.1	Présentation du banc d'essai SHAPE	154
7.1.2	Principaux résultats expérimentaux disponibles	157
7.2	Simulations 2D de nappes liquides planes cisillées.	160
7.2.1	Paramètres numériques	161
7.2.2	Résultats des simulations 2D monophasiques	164
7.2.3	Résultats des simulations 2D diphasiques du cœur liquide (sans couplage avec le modèle d'atomisation)	179
7.2.4	Résultats des simulations 2D avec la méthodologie de couplage	189
7.3	Simulations 3D de la nappe liquide plane cisillée	194
7.3.1	Paramètres numériques	194
7.3.2	Résultats des simulations 3D diphasiques du cœur liquide (sans couplage avec le modèle d'atomisation)	194
7.3.3	Résultats préliminaires des simulations 3D avec la méthodologie de couplage	196
7.4	Conclusion du chapitre	201
8	Conclusions générales et perspectives	205

Table des figures

1.1	Visualisation de la zone d'atomisation primaire et d'atomisation secondaire d'une nappe liquide cisailée par un co-courant gazeux.	22
1.2	Caractérisation des régimes d'atomisation primaire d'une nappe liquide cisailée, d'après [84]. À gauche "cellular breakup". À droite "stretched streamwise ligament breakup".	23
1.3	Classification des régimes d'atomisation d'une nappe liquide cisailée en fonction du MFR, d'après Gutierrez Fernandez <i>et al.</i> [43]	23
1.4	(a) Régime de rupture d'une goutte en fonction du Weber d'après [57], (b) Régime de déformation et de rupture en fonction du Weber et du Ohnesorge d'après [49]	24
1.5	Simulation d'un jet liquide Diesel par Ménard <i>et al.</i> [66]	27
1.6	Simulation DNS (avec 6 milliard de points de calcul) de l'atomisation primaire d'un jet liquide avec une méthode de couplage VOF/LS [83]	28
1.7	Simulation 3D d'une nappe liquide cisailée réalisée avec une méthode Level-Set conservative dans le code OpenFOAM Pringuet [75]	29
1.8	Simulation 2D d'une nappe liquide avec une méthode Level-Set conservative par Raessi et Pitsch [77]. Visualisation de l'interaction entre la nappe et l'écoulement gazeux.	30
1.9	Simulation 3D d'une nappe liquide cisailée avec le code DIGIMESH [78]. Visualisation de l'interface gaz/liquide.	31
1.10	Simulation stochastique de l'atomisation d'un jet liquide cisailé par courant gazeux : visualisation de la probabilité de présence du cœur liquide et du transport des parcelles (population de gouttes) dans le champs de gaz résolu avec une LES, extrait de [53]	32
2.1	Notations associées à une cellule Ω_i et une de ses voisines Ω_j	43
2.2	Définition des cellules limites.	44
2.3	Définition des voisinages de faces et de sommets pour une cellule Ω_i (grisée). L'ensemble $\mathcal{V}_f(i)$ contient les indices des cellules voisines colorées en rouge. L'ensemble $\mathcal{V}_s(i)$ contient les indices des cellules voisines colorées en rouge et des cellules voisines non-colorées.	44
2.4	Identification des points utilisés pour le calcul du gradient discret au centre \mathbf{G}_i d'une cellule Ω_i par la méthode des moindres carrés.	48
2.5	Identification des points utilisés pour le calcul du gradient discret au centre \mathbf{B}_{ij} d'une face Γ_{ij} par la méthode des moindres carrés.	48
2.6	Identification des points utilisés pour l'interpolation des valeurs discrètes connues aux centres des cellules vers un sommet \mathbf{P}_i par la méthode des moindres carrés.	49
2.7	Configuration géométrique du disque de Zalesak [101].	62
2.8	Exemple de maillages utilisés pour la simulation du disque de Zalesak	63

2.9	Résultats des simulations du disque de Zalesak après une rotation, obtenus avec des maillages cartésiens et uniformes. Échelle de couleur : solution numérique (bleu : $q = 0$, rouge : $q = 1$), - - solution exacte.	64
2.10	Résultats des simulations du disque de Zalesak après une rotation, obtenus avec des maillages de type Delaunay. Échelle de couleur : solution numérique (bleu : $q = 0$, rouge : $q = 1$), - - solution exacte.	65
2.11	Influence de la valeur du pas du temps Δt sur la résolution du disque de Zalesak avec le limiteur compressif proposé φ^{comp} . Échelle de couleur : solution numérique (bleu : $q = 0$, rouge : $q = 1$), - - solution exacte.	66
2.12	Résultats pour le cas test du serpent à $t = 3s$ obtenus avec des maillages cartésiens et uniformes. <i>En noir</i> : solution de référence; <i>en rouge</i> : iso-contour $q = 0.5$ de la solution numérique	68
2.13	Résultats pour le cas test du serpent à $t = 3s$ obtenus avec des maillages de type Delaunay. <i>En noir</i> : solution de référence; <i>en rouge</i> : iso-contour $q = 0.5$ de la solution numérique	69
3.1	Algorithme à pas fractionnaires pour la discrétisation temporelle du spray couplée au fluide porteur	79
4.1	Schéma de principe de l'architecture d'un ordinateur à mémoire distribuée.	85
4.2	Représentation schématique de l'architecture hybride d'un ordinateur à mémoire distribuée, constitué de nœuds de calcul à mémoire partagée.	86
4.3	Principe de la méthode de recouvrement des communications MPI par des calculs.	88
4.4	Exemple de partitionnement d'un maillage en deux sous-domaines. Chaque sous-domaine est assigné à un processus MPI.	92
4.5	Identification des différentes catégories de cellule dans le cas du partitionnement du maillage de la Figure 4.4.	92
4.6	Résultats de l'étude des performances de la parallélisation du code SLOSH (voir paragraphe §4.2.3 pour la définition de l'accélération et de l'efficacité)	97
5.1	Configuration géométrique pour la simulation de l'oscillation amortie d'une onde de surface.	101
5.2	Évolution temporelle de l'amplitude de l'oscillation de l'onde de surface. Comparaison entre les résultats numériques et analytiques pour différents rapports de densité et différentes résolutions spatiales.	102
5.3	Configuration du cas test de l'instabilité de Rayleigh-Taylor.	104
5.4	Évolution temporelle de l'amplitude de la perturbation a au cours du temps à la position $x = 0$ en fonction du coefficient de tension de surface avec un maillage 128×256	105
5.5	Diagramme de dispersion de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Comparaison entre la relation de dispersion théorique (5.6) et les taux de croissance calculés par les simulations.	106
5.6	Évolution temporelle de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en régime non-linéaire. Simulation effectuée sur un maillage (256×1024) . (Le champ α_h désigne la fraction volumique du fluide 2.)	108
5.7	Comparaison au temps final $t = 0.9s$ des résultats des simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor effectuées avec différentes résolutions du maillage : (a) 32×128 , (b) 64×256 , (c) 128×512 , (d) 256×1024 . (Le champ α_h désigne la fraction volumique du fluide 2.)	108

5.8	Comparaison au temps final $t = 0.9s$ entre un résultat de simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor obtenu avec SLOSH et les résultats de référence. (a) : méthode de "front-tracking" avec un maillage 64×256 [74], (b) : méthode "VOF/PLIC" avec un maillage 128×512 [74], (c) méthode à interface diffuse du code SLOSH avec un maillage 128×512	109
5.9	Configurations géométriques pour les deux cas de simulations de collisions de gouttes. (a) : configuration 3D pour le cas 1. (b) : configuration 2D axisymétrique pour le cas 2.	111
5.10	Comparaison entre les résultats expérimentaux [5] et les résultats numériques pour les deux cas de collision de gouttes. Première rangée : clichés expérimentaux. Seconde rangée : résultats numériques (iso-surface de fraction volumique liquide $\alpha_l = 0.5$ symbolisant l'interface).	113
5.11	Cas de validation du couplage entre le solveur à phases séparées et le solveur à phase dispersée. (a) : Configuration du maillage avec une particule par cellule. (b) : Comparaison des résultats analytiques et numériques pour l'évolution temporelle de la quantité du mouvement.	115
5.12	Configuration du cas test de la perte de charge dans un écoulement chargé en particules.	116
5.13	Simulation de la perte de charge ($\Delta t = 8 \times 10^{-4}s$). Évolution des grandeurs en fonction de la position dans la conduite : (a) pression du gaz, (b) flux de quantité de mouvement du gaz, (c) densité du gaz, (d) fraction volumique du chargement en particules.	117
5.14	Étude de la convergence temporelle du schéma bas-Mach pour la simulation de la perte de charge dans un écoulement chargé en particules.	117
6.1	Vue schématique de la méthodologie de couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray à travers un modèle d'atomisation et un modèle de ré-impact.	120
6.2	Vue globale du couplage des équations du modèle bifluide et du modèle de spray à travers les équations d'un modèle d'atomisation et d'un modèle de ré-impact. Les flèches désignent les termes de couplage entre deux modèles.	122
6.3	Définition de la fonction masque χ_a pour le modèle d'atomisation. La zone grisée représente la zone où l'atomisation est autorisée par chacun des termes de l'expression (6.7)	126
6.4	Identification des scénarios d'atomisation selon l'angle θ_a entre la normale à l'interface et la vitesse locale à l'écoulement.	126
6.5	Schéma 1D de la configuration correspondant au ré-impact d'une particule numérique p sur une surface Σ (la normale à l'interface \mathbf{n}_Σ est confondue avec l'axe x).	133
6.6	Algorithme de couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray.	140
6.7	Configuration du cas test de validation pour le modèle de ré-impact.	147
6.8	Simulation multi-échelle du remplissage d'un réservoir avec un spray de gouttes impactant la paroi du bas.	149
6.9	Courbes d'évolution temporelle du transfert de la masse du liquide obtenues pour la simulation du cas test de ré-impact.	150
7.1	Profil naca de l'injecteur.	155
7.2	Schéma global du banc d'essai SHAPE.	155
7.3	Configurations obtenues en insérant différentes cales (en vert et en bleu) dans la veine d'air. Les configurations divergentes (D) sont à gauche et les configurations convergentes (C) à droite.	156

7.4	Caractérisation des couches limites de l'écoulement de gaz à la sortie de la veine d'air [27].	157
7.5	Vue de dessus d'une nappe liquide cisailée obtenue par ombroscopie [27]. . .	158
7.6	Protocole expérimental utilisé dans [27] pour la mesure de la longueur de rupture moyenne du cœur liquide.	158
7.7	Évolution de la longueur de rupture du cœur liquide en fonction de la vitesse d'air pour différentes configurations géométriques (extrait de [27]).	159
7.8	Protocole expérimental utilisé dans [27] pour la détermination de la fréquence de battement longitudinale de la nappe liquide.	160
7.9	Plan médian correspondant à la configuration 2D.	161
7.10	Visualisation d'un des maillages 2D utilisé pour la configuration D_{22} . À droite : vue globale. À gauche : zoom sur la zone plus résolue en aval du point d'injection de la nappe liquide.	162
7.11	Configuration en sortie d'injecteur.	163
7.12	Champs instantanés de la vorticit� de l'�coulement gazeux dans la veine d'air obtenus par les simulations 2D monophasiques.	166
7.13	Visualisation des champs moyens obtenus par simulation monophasique 2D dans la configuration $C_9V_{50}N_{10}$	168
7.14	Visualisation des champs moyens obtenus par simulation monophasique 2D dans la configuration $D_{22}V_{50}N_{10}$	169
7.15	Comparaison des profils de couche limite de l'�coulement d'air sur la paroi NACA de l'injecteur.	171
7.16	Visualisation du d�collement de la couche limite d'un des c�t�s de l'injecteur pour la configuration $D_{22}V_{50}N_{10}$ en monophasique. L�gende : lignes de courant de l'�coulement moyen (en noir) superpos�es au champ de vorticit� instantan�e.	171
7.17	Plans de mesure des profils de vitesse en aval de l'injecteur pour les deux configurations g�om�triques, positionn�s � $d = \{1.5mm, 5mm, 10mm, 20mm\}$	172
7.18	Profils de la vitesse moyenne du gaz en aval de l'injecteur pour la configuration C_9V_{50} . L�gende : $-$ simulation avec maillage de r�f�rence (N_{10}) , $-$ simulation avec maillage fin (N_{20}) , \square mesures exp�rimentales [27]	174
7.19	Profils de la vitesse RMS du gaz en aval de l'injecteur pour la configuration C_9V_{50} . L�gende : $-$ simulation avec maillage de r�f�rence (N_{10}) , $-$ simulation avec maillage fin (N_{20}) , \square mesures exp�rimentales [27]	175
7.20	Profils de la vitesse moyenne du gaz en aval de l'injecteur pour la configuration $D_{22}V_{50}$. L�gende : $-$ simulation avec maillage de r�f�rence (N_{10}) , \triangleright mesures exp�rimentales [27] pour $D_{22}V_{40}$, \square mesures exp�rimentales [27] pour $D_{22}V_{50}$	176
7.21	Profils de la vitesse RMS du gaz en aval de l'injecteur pour la configuration $D_{22}V_{50}$. L�gende : $-$ simulation avec maillage de r�f�rence (N_{10}) , \triangleright mesures exp�rimentales [27] pour $D_{22}V_{40}$, \square mesures exp�rimentales [27] pour $D_{22}V_{50}$	177
7.22	FFT du signal de vitesse longitudinale mesur� dans le sillage de l'injecteur pour la configuration $D_{22}V_{50}N_{10}$ en monophasique.	178
7.23	Comparaison de la fr�quence de d�tachement des tourbillons de Von-Karman (cas monophasique) et de la fr�quence de battement de la nappe liquide. R�sultats des mesures exp�rimentales de D�jean [27] pour la configuration D_{22}	179

7.24	Champs instantanés de l'écoulement diphasique en sortie d'injecteur obtenus par les simulations 2D des configurations $C_9V_{30}N_{10}$, $C_9V_{50}N_{10}$ et $C_9V_{80}N_{10}$ avec le modèle bifluide. Légende : champ de la norme de la vorticit� dans la phase gaz $ \omega $ superpos� au champ de fraction volumique liquide α_l . Trait blanc vertical : distance de rupture moyenne du c�ur liquide mesur�e exp�rimentalement. . .	181
7.25	Champs instantan�s de l'�coulement diphasique en sortie d'injecteur obtenus par les simulations 2D des configurations $D_{22}V_{30}N_{10}$, $D_{22}V_{50}N_{10}$ et $D_{22}V_{80}N_{10}$ avec le mod�le bifluide. L�gende : champ de la norme de la vorticit� dans la phase gaz $ \omega $ superpos� au champ de fraction volumique liquide α_l . Trait blanc vertical : distance de rupture moyenne du c�ur liquide mesur�e exp�rimentalement. . .	182
7.26	�volution temporelle du c�ur liquide. L�gende : isocontour $\alpha_l = 0.5$ � diff�rents instants avec un intervalle de temps $\Delta t = 0.1ms$	183
7.27	Influence du maillage sur la r�solution du c�ur liquide avec le mod�le bifluide. Champs instantan�s de fraction volumique du liquide visualis�s � des instants diff�rents.	184
7.29	�volution de la fr�quence d'oscillation du c�ur liquide en fonction de la distance � l'injecteur, pour la g�om�trie D_{22}	187
7.31	�volution de la fr�quence d'oscillation du c�ur liquide en fonction de la distance � l'injecteur, pour la g�om�trie C_9	187
7.32	Influence de la vitesse de l'�coulement d'air V_g^{max} pour la configuration C_9 . Comparaisons des r�sultats exp�rimentaux (exp.) et num�riques 2D (simu.).	188
7.33	Influence de la vitesse de l'�coulement d'air V_g^{max} pour la configuration D_{22} . Comparaisons des r�sultats exp�rimentaux (exp.) et num�riques 2D (simu.).	188
7.34	Visualisation du couplage entre le mod�le bifluide et le mod�le de spray gr�ce au mod�le d'atomisation. L�gende : champ de fraction volumique liquide dans le mod�le bifluide α_l , particules num�riques repr�sent�es par des points blancs	190
7.35	Vues instantan�es des sprays obtenus par simulations 2D multi-�chelles, pour diff�rentes vitesses d'air dans la configuration D_{22} . L�gende : vitesse longitudinale de l'air Vx , c�ur liquide en rouge, spray (particules num�riques) en noir.	192
7.36	Champs moyens de la fraction volumique du spray $\langle \alpha_p \rangle$ obtenus par simulations 2D multi-�chelles, pour diff�rentes vitesses d'air dans la configuration D_{22} (seuillage pour $\langle \alpha_p \rangle$ inf�rieure � $10E-5$).	193
7.37	Vue globale du domaine utilis� pour la simulation 3D de la configuration C_9V_{80} .	195
7.38	(partie 1/3)	197
7.38	(partie 2/3)	198
7.38	(partie 3/3). Visualisation de l'oscillation globale de la nappe liquide simul�e avec le mod�le bifluide pour la configuration $C_9V_{80}N_{10}$	199
7.39	Comparaison qualitative entre la topologie du c�ur liquide obtenue par la simulation 3D avec le mod�le bifluide, et celle observ�e exp�rimentalement pour une configuration similaire. Vues de dessus.	200
7.40	Influence de la vitesse de l'�coulement d'air sur le c�ur liquide. Comparaison entre les r�sultats de simulation 2D, 3D et exp�rimentaux.	201
7.41	Vue de c�t� du r�sultat de la simulation 3D compl�te de l'atomisation de la nappe liquide. L�gende : isosurface ($\alpha_l = 0.2$) du c�ur liquide en vert, gouttes en bleu, norme de la vorticit� de l'�coulement d'air en d�grad� de rouge. . .	202
7.42	Vue 3/4 avant du r�sultat de la simulation 3D compl�te de l'atomisation de la nappe liquide. L�gende : isosurface ($\alpha_l = 0.2$) du c�ur liquide en vert, gouttes en bleu, norme de la vorticit� de l'�coulement d'air en d�grad� de rouge. . . .	203

Liste des tableaux

2.1	Étude de la convergence en maillage pour la simulation du disque de Zalesak avec les différents limiteurs.	64
4.1	Liste des principaux modes de communication point-à-point.	87
5.1	Propriétés des fluides utilisés selon les cas considérés lors des simulations de l'oscillation d'onde de surface.	100
5.2	Résultats de l'étude de la convergence en maillage pour la simulation de l'oscillation d'une onde de surface.	103
5.3	Propriétés des fluides utilisés pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le régime linéaire.	104
5.4	Paramètres utilisés pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le régime linéaire.	104
5.5	Résultats de l'étude de la convergence en maillage pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh Taylor en régime linéaire.	106
5.6	Propriétés des fluides utilisés pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le régime non-linéaire.	107
5.7	Paramètres utilisés pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le régime non-linéaire.	107
5.8	Nombre adimensionnel caractérisant les deux cas simulés de collisions binaires de gouttes.	110
5.9	Propriétés des fluides utilisés pour les simulations de collisions binaires de gouttes.	111
5.10	Paramètres utilisés pour les simulations de collisions de gouttes	111
5.11	Propriétés du gaz et des particules utilisées pour les simulations concernant la validation du couplage pour la quantité de mouvement.	114
5.12	Propriétés du gaz et des particules utilisées pour les simulations concernant le cas test de la perte de charge dans un écoulement chargé en particules.	116
6.1	Convention de notation pour les indices des variables utilisées dans chaque modèle.	121
6.2	Propriétés du gaz et du liquide dans le modèle bifluide, et des particules numériques dans le modèle de spray	146
7.1	Propriétés de l'air et de l'eau	156
7.2	Plage de valeurs des nombres adimensionnels caractéristiques étudiés dans [27].	156
7.3	Paramètres numériques liés aux maillages N_{10} et N_{20} utilisés dans les configurations $C_9[V_{30}-V_{50}-V_{80}]$	162
7.4	Paramètres numériques liés aux 3 maillages utilisés selon la vitesse V_g^{max} dans la configuration D_{22}	163

7.5	Débits surfaciques de masse de gaz \dot{M}_g^{2D} imposés en entrée de la veine d'air et vitesses maximales de l'écoulement de gaz en sortie de veine obtenues avec les simulations 2D des différentes configurations.	164
7.6	Matrice des cas de simulation 2D. Légende : "mono" = simulation monophasique, "diph" = simulation diphasique du cœur liquide (sans couplage), "diph+spray" = simulation diphasique complète avec couplage.	165
7.7	Temps T_{avg} durant lesquels sont moyennés les champs gazeux au cours des simulations monophasiques.	167
7.8	Résultats des fréquences des lâchers des tourbillons de Von-Karman obtenus pour la configuration D ₂₂ V ₅₀ N ₁₀	178
7.9	Diamètres des gouttes imposés lors des simulations 2D multi-échelles de la configuration D ₂₂ avec différentes vitesses d'air.	189
7.10	Paramètres numériques de la simulation 3D pour la configuration C ₉ V ₈₀	195

Introduction générale

Contexte de l'étude

Afin de réduire l'impact environnemental de l'augmentation du trafic aérien prévue au cours des prochaines années, des normes de plus en plus strictes sont imposées aux avionneurs. En Europe, par exemple, l'ACARE¹ a fixé pour objectif une réduction des émissions de CO₂ de 50% et des NO_x de 80% d'ici 2020. Dans ce contexte, les motoristes cherchent donc à améliorer les performances des moteurs d'avions.

La réduction des émissions polluantes d'un turboréacteur est un objectif difficile à atteindre car elle nécessite une connaissance détaillée des nombreux phénomènes physiques mis en jeu dans une chambre de combustion. Parmi les différents axes de recherche, le contrôle de l'injection du carburant est un enjeu majeur. En pratique, celle-ci est réalisée grâce à des injecteurs dont le rôle est de pulvériser le carburant liquide jusqu'à l'obtention d'un spray de fines gouttelettes : c'est le processus d'atomisation. Il permet de maximiser la surface d'échange entre l'air et le carburant afin de favoriser l'évaporation de ce dernier et donc de créer un mélange gazeux air/carburant optimal vis-à-vis de la combustion.

L'amélioration des injecteurs est généralement réalisée grâce à des campagnes d'essais expérimentales qui permettent d'étudier les caractéristiques du spray généré en fonction de la géométrie de l'injecteur et des conditions opératoires. Cette approche a cependant plusieurs limitations. La première est liée aux coûts importants qu'implique la réalisation d'un prototype d'injecteur pour chaque géométrie que l'on souhaite étudier. La deuxième est liée à la difficulté de mettre en œuvre des méthodes de mesure précises et non-intrusives pour des configurations géométriques complexes et des conditions de fonctionnement réalistes (pressions et températures élevées en fonctionnement nominal du moteur ou pressions et températures faibles pour un redémarrage du moteur en altitude). Face à ces limitations, les industriels s'orientent de plus en plus vers des outils de simulation numérique qui offrent une approche complémentaire et à moindre coût.

Au cours de cette dernière décennie, l'augmentation importante de la puissance des supercalculateurs a contribué à l'adoption d'outils de simulation numérique de plus en plus performants au sein de l'industrie. Ainsi, la simulation aux grandes échelles (LES) s'est récemment imposée (chez SAFRAN-Turbomeca par exemple) comme l'outil de référence permettant d'effectuer des simulations détaillées et instationnaires de l'écoulement turbulent dans une chambre de combustion. Avec cette approche, le transport et l'évaporation du spray sont généralement bien décrits à l'aide de modèles dits à phase dispersée mais le processus d'atomisation n'est pas simulé.

Le processus de création du spray est difficile à simuler en raison de son caractère multi-échelle : les gouttelettes produites ont un diamètre de l'ordre d'une dizaine de micromètres, l'orifice de l'injecteur un diamètre de quelques millimètres et les dimensions de la chambre de combustion sont typiquement de quelques dizaines de centimètres. En pratique, le spray

1. Advisory Council for Aviation Research and innovation in Europe

est directement injecté dans le domaine de calcul en estimant les caractéristiques des gouttes qui le composent à partir des données expérimentales disponibles. Le problème d'une telle approche réside dans le fait que, d'une part, il est nécessaire de disposer d'une caractérisation expérimentale du spray pour réaliser la simulation (or les mesures ne sont pas toujours réalisables pour les conditions opératoires que l'on souhaite étudier numériquement) et, d'autre part, l'injection du spray est alors une condition limite statistique qui ne permet pas de prendre en compte les phénomènes instationnaires liés à un couplage entre la phase liquide et l'écoulement gazeux. Pour lever ce verrou, il est donc essentiel de disposer de méthodes numériques permettant de prendre en compte le processus d'atomisation

La grande majorité des travaux menés jusqu'à présent sur ce sujet porte sur le développement de méthodes de simulation directe (DNS), c'est-à-dire de méthodes visant à reproduire la totalité des échelles présentes dans le processus d'atomisation de la phase liquide. Bien que les résultats obtenus avec de tels outils soient très adaptés à la compréhension des phénomènes physiques, ceux-ci présentent des limitations importantes en terme de coût de calculs, qui les rendent inexploitable dans un contexte industriel où les géométries étudiées sont complexes et où il est nécessaire de faire varier de nombreux paramètres. Typiquement, pour un maillage constitué de mailles de $1\mu m^3$, il faudrait 10^{12} cellules pour simuler les phénomènes physiques se produisant dans un volume de $1cm^3$.

La modélisation numérique du processus d'atomisation dans les simulations de configurations industrielles nécessite donc le développement d'une méthode intermédiaire, capable à la fois de simuler l'influence de la géométrie et des conditions opératoires sur la fragmentation du carburant mais également de décrire l'évolution du spray dans la chambre de combustion.

Objectif de l'étude

L'objectif de cette thèse est de concevoir une nouvelle approche qui permettrait de lever le verrou lié à la modélisation du processus d'atomisation pour la simulation complète du fonctionnement d'une chambre de combustion industrielle. La méthodologie proposée doit permettre de prévoir l'influence de la géométrie et des conditions opératoires sur le spray généré par l'injecteur industriel.

Compte-tenu du caractère multi-échelle du phénomène que l'on souhaite simuler, la méthode retenue consiste à coupler un modèle bifluide (pour lequel la phase gazeuse et la phase liquide sont traitées de manière symétrique) et un modèle de spray (pour lequel la phase liquide est traitée comme des inclusions sphériques). Le premier modèle doit permettre de décrire les grandes échelles du phénomène d'atomisation, correspondant à la formation de ligaments et d'amas liquides à partir du cœur liquide. Le second modèle doit permettre de décrire l'évolution du brouillard de gouttelettes issues de la fragmentation primaire du jet de carburant dans la zone située en aval de l'injecteur. Un point délicat, à la fois sur le plan de la modélisation et sur celui de l'algorithmique, réside dans le couplage des deux modèles. Pour cela, une méthodologie robuste, basée sur l'introduction d'un modèle d'atomisation et d'un modèle de ré-impact, doit être développée.

Une configuration à la fois simple à mettre en œuvre et pertinente vis-à-vis des applications visées est le cas d'une nappe liquide plane cisailée par des courants gazeux à haute vitesse. Pour ces raisons, de nombreuses études expérimentales et numériques ont été réalisées à l'Onera sur ce cas. Dans le cadre de cette thèse, la méthodologie proposée a donc été appliquée pour traiter cette configuration afin de valider les résultats obtenus par comparaison avec l'expérience.

Plan du manuscrit

Ce mémoire est organisé en sept chapitres.

Dans le chapitre §1, nous présentons un état de l’art général sur l’atomisation en décrivant les caractéristiques et les principaux paramètres influant sur ce mécanisme. Les différentes méthodes numériques existantes pour simuler le processus d’atomisation sont ensuite présentées, en soulignant les capacités et les limitations de celles-ci, afin d’orienter et de justifier les choix qui ont été faits au cours de cette étude. Ce chapitre se termine par la présentation de l’approche retenue.

Le modèle bifluide et le modèle de spray sont décrits dans les chapitres §2 et §3 respectivement. Les hypothèses, les équations, et les méthodes numériques associées à chaque modèle sont présentées dans ces chapitres.

Les nouvelles méthodes développées ont toutes été implémentées dans le code de recherche SLOSH. Le chapitre §4 est dédié à la présentation de ce code ainsi qu’aux importantes améliorations qui ont été réalisées (en particulier) afin de le paralléliser, étape indispensable dans le contexte de cette thèse.

Le chapitre §5 est consacré à la validation des méthodes numériques utilisées pour la discrétisation du modèle bifluide et du modèle de spray. Les cas tests utilisés correspondent à des configurations académiques bien référencées dans la littérature. Ceux-ci permettent de s’assurer que la méthodologie adoptée permet de contrôler correctement la diffusion numérique de l’interface liquide/gaz et de reproduire avec une précision satisfaisante les mécanismes physiques élémentaires mis en jeu dans le processus d’atomisation (phénomènes inertiels, visqueux, capillaires, ...) et le transport du spray.

Au chapitre §6, nous présentons la méthodologie de couplage entre le modèle bifluide, présenté au chapitre §2, et le modèle de spray présenté au chapitre §3.

Le dernier chapitre présente les premières applications de la méthodologie complète appliquée à la simulation de l’atomisation d’une nappe liquide cisailée. On décrit tout d’abord les résultats obtenus dans le cas de simulations bidimensionnelles que l’on confronte aux résultats expérimentaux de Déjean [27]. On présente pour finir quelques résultats tridimensionnels qui illustrent les potentialités de la méthode.

Chapitre 1

État de l'art

Sommaire

1.1	Principes de l'atomisation assistée	21
1.1.1	Définition générale de l'atomisation	21
1.1.2	Description de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée	22
1.1.2.1	L'atomisation primaire	22
1.1.2.2	L'atomisation secondaire	23
1.2	Les principaux types d'injecteurs	25
1.2.1	Les injecteurs pressurisés	25
1.2.2	Les injecteurs <i>airblast</i>	25
1.3	État de l'art de la simulation numérique de l'atomisation primaire	26
1.3.1	Les approches <i>DNS</i>	26
1.3.2	Approches dites « phénoménologiques »	30
1.3.2.1	Les approches stochastiques	30
1.3.2.2	Modèle ELSA	31
1.4	Approche retenue pour la modélisation de l'atomisation assistée	32

Dans ce chapitre, nous présentons un état de l'art sur l'atomisation en décrivant les caractéristiques et les principaux paramètres influant sur ce mécanisme. Les différentes méthodes numériques existantes pour simuler le processus d'atomisation sont ensuite présentées, en soulignant les capacités et les limitations de celles-ci, afin de justifier les choix qui ont été faits au cours de cette étude. Ce chapitre se termine par la présentation de l'approche développée au cours de la thèse.

1.1 Principes de l'atomisation assistée

1.1.1 Définition générale de l'atomisation

L'atomisation désigne l'action de fragmenter en fines gouttelettes une masse liquide initialement sous forme continue. Ce processus nécessite donc l'apport d'une énergie capable de vaincre les forces de cohésion du liquide liées à la tension de surface. Dans le cas de l'atomisation de type *airblast*, cet apport d'énergie provient d'un transfert entre l'écoulement gazeux environnant et la phase liquide grâce à une différence de vitesses initiales permettant de générer des instabilités hydrodynamiques. Celles-ci se développent ensuite jusqu'à la rupture de la masse liquide en gouttes de plus en plus fines.

1.1.2 Description de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée

Dans le cas de l'atomisation *airblast* d'une nappe liquide, plusieurs études expérimentales ont permis de mettre en évidence deux étapes dans le processus d'atomisation : l'atomisation primaire et l'atomisation secondaire (cf. Figure 1.1).

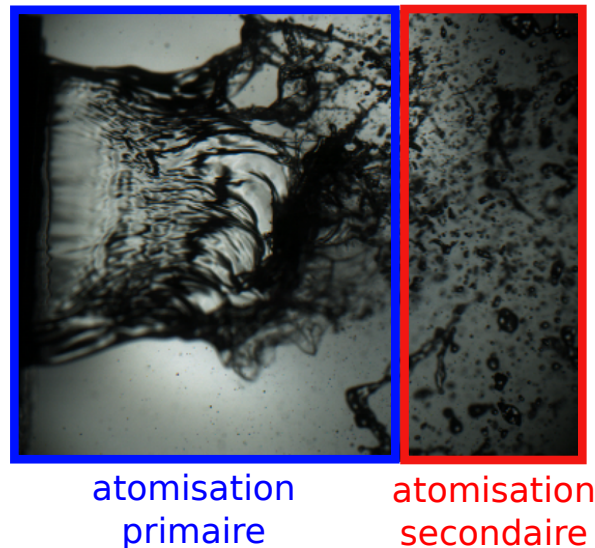


FIGURE 1.1 – Visualisation de la zone d'atomisation primaire et d'atomisation secondaire d'une nappe liquide cisailée par un co-courant gazeux.

1.1.2.1 L'atomisation primaire

Le processus d'atomisation primaire se produit dès la sortie de l'injecteur. Dans cette région, le liquide est injecté sous la forme d'un cœur liquide soumis à des instabilités de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz. Ces instabilités font apparaître des ondes sinusoïdales et variqueuses [29] à l'interface gaz-liquide dans le sens privilégié de l'écoulement. Ces ondes vont ensuite croître très rapidement jusqu'à provoquer une oscillation globale de la nappe.

L'instabilité de Kelvin-Helmholtz est suivie par des instabilités de Rayleigh-Taylor [62]. Ces dernières conduisent à l'apparition d'ondes transverses qui s'amplifient jusqu'à la formation de ligaments. Ces ligaments sont ensuite étirés jusqu'à ce qu'ils soient fragmentés grâce aux effets aérodynamiques liés à l'écoulement gazeux.

Stapper et Samuelsen [84] ont montré l'influence de la vitesse de l'écoulement gazeux sur l'atomisation primaire en distinguant deux régimes d'atomisation (cf. Figure 1.2) :

- ▷ "cellular breakup" : dans ce régime, la nappe bat comme un drapeau au vent sous l'influence des ondes longitudinales, ce qui conduit à l'apparition d'ondes de surface transversales. La présence combinée d'ondes longitudinales et transverses de longueurs d'onde du même ordre de grandeur conduit à la formation de cellules liquides qui se pulvérisent rapidement.
- ▷ "stretched streamwise ligament breakup" : dans ce régime, le battement de la nappe est moins important car la croissance des ondes transverses est plus rapide ce qui conduit à l'atomisation du liquide avant que les ondes longitudinales n'aient le temps de se développer. Ce régime est prévalent lorsque la vitesse d'injection du liquide est faible par rapport à la vitesse du gaz.

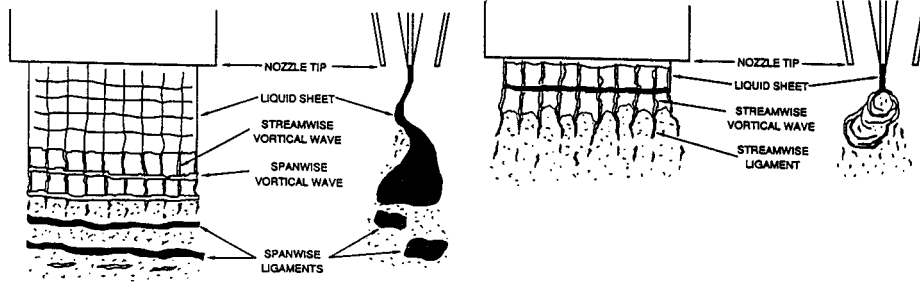


FIGURE 1.2 – Caractérisation des régimes d'atomisation primaire d'une nappe liquide cisailée, d'après [84]. À gauche "cellular breakup". À droite "stretched streamwise ligament breakup".

Plus récemment, cette classification a été reprise par Gutierrez Fernandez *et al.* [43] qui a proposé quatre régimes d'atomisation en fonction du rapport de flux de quantité de mouvement (MFR) (cf. Figure 1.3).

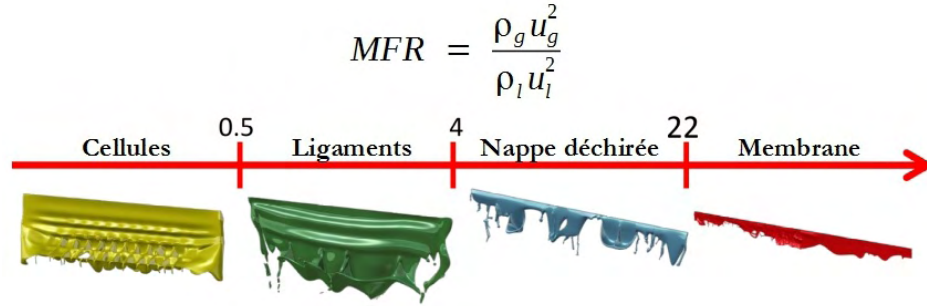


FIGURE 1.3 – Classification des régimes d'atomisation d'une nappe liquide cisailée en fonction du MFR, d'après Gutierrez Fernandez *et al.* [43]

1.1.2.2 L'atomisation secondaire

On nomme *atomisation secondaire* le processus physique de rupture auquel est soumis le brouillard de gouttes, issu de l'atomisation primaire, sous l'effet de forces aérodynamiques. L'identification des régimes de rupture des gouttes a fait l'objet de nombreuses études, dont par exemple [9, 49, 57]. Ces études se basent principalement sur le nombre de Weber et d'Ohnesorge pour définir la plage de prédominance de chaque régime (voir Figure 1.4). On rappelle l'expression des nombres de Weber et d'Ohnesorge définis pour la goutte :

$$We = \frac{\rho_g (u_g - u_{goutte})^2 d_{goutte}}{\sigma}, \quad Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma d_{goutte}}} = \frac{\sqrt{We}}{Re} \quad (1.1)$$

où u_g et ρ_g sont respectivement la vitesse et la densité du gaz et u_{goutte} , ρ_l , μ_l sont respectivement la vitesse, la densité et la viscosité dynamique de la goutte. Ces nombres font également intervenir le coefficient de tension de surface σ .

La Figure 1.4a et la Figure 1.4b montrent deux exemples de classification. Sur la première l'auteur distingue cinq régimes. Pour de faibles valeurs du nombre de Weber ($We < 12$) la goutte reste stable. L'augmentation de ce nombre caractéristique conduit ensuite à l'observation de différents modes de ruptures qui vont engendrer des populations de gouttes de tailles caractéristiques différentes dans le spray final.

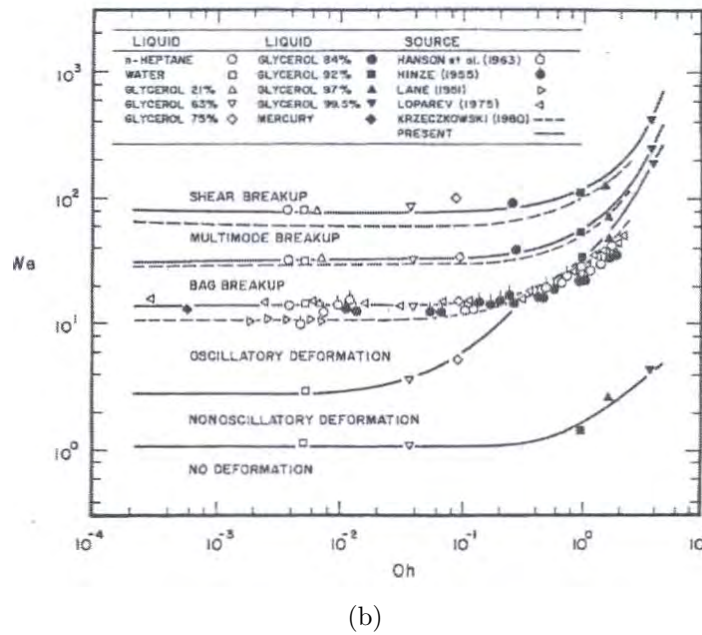
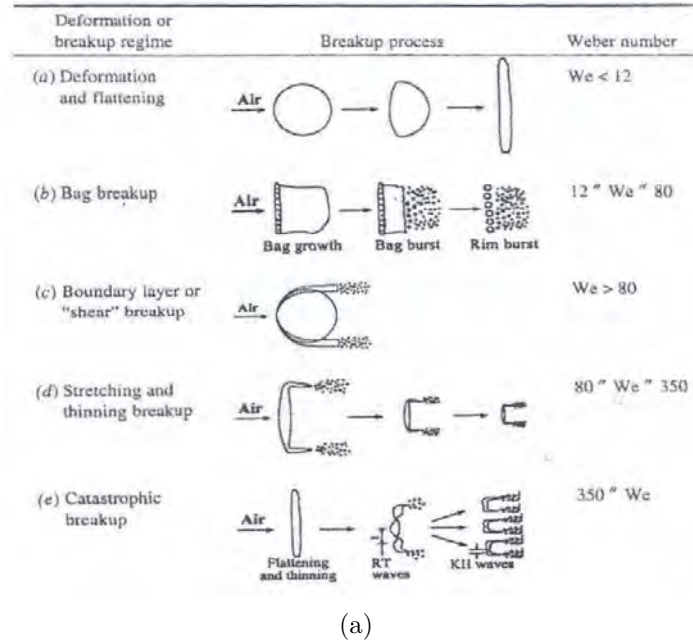


FIGURE 1.4 – (a) Régime de rupture d'une goutte en fonction du Weber d'après [57], (b) Régime de déformation et de rupture en fonction du Weber et du Ohnesorge d'après [49]

1.2 Les principaux types d'injecteurs

Dans l'industrie, il existe de nombreux types d'injecteurs. Dans [58], l'auteur propose une classification de la plupart d'entre eux selon les mécanismes physiques fournissant la source d'énergie permettant de pulvériser une masse de liquide. Dans les paragraphes suivants, on présente les deux types d'injecteurs les plus utilisés pour l'injection du carburant dans la chambre de combustion d'un turboréacteur, à savoir les injecteurs pressurisés et les injecteurs *airblast*.

1.2.1 Les injecteurs pressurisés

Les injecteurs pressurisés sont des injecteurs utilisés dans une large gamme d'applications comme par exemple dans l'agriculture, dans les cosmétiques, ou encore dans les moteurs automobiles et aéronautiques. Le principe de ces injecteurs consiste à mettre sous pression une masse de liquide afin qu'elle s'écoule à forte vitesse à travers un petit orifice vers un milieu au repos. La différence de vitesse entre le liquide et le milieu environnant va conduire à la désintégration de la masse de liquide jusqu'à l'obtention d'un brouillard de gouttes.

Les injecteurs pressurisés ont l'avantage d'être relativement simples à mettre en œuvre et peu onéreux. Le contrôle de la granulométrie du spray généré peut être effectué en pilotant la pression d'injection du liquide : plus la pression d'injection augmente, plus le diamètre moyen des gouttes obtenues diminue. Toutefois, l'énergie nécessaire et la masse du système augmentent très rapidement lorsqu'on souhaite pressuriser une masse de liquide importante et obtenir une granulométrie satisfaisante. Pour cette raison, ces injecteurs ne sont pas optimaux pour l'injection du carburant dans les moteurs aéronautiques même s'ils sont couramment utilisés dans les phases de régime transitoire (démarrage, redémarrage en altitude, bas régime) durant lesquelles les injecteurs *airblast* ne sont pas adaptés.

1.2.2 Les injecteurs *airblast*

Les injecteurs *airblast* sont principalement utilisés dans les moteurs aéronautiques. Leur principe de fonctionnement consiste à prélever une partie de l'écoulement d'air à forte vitesse en sortie des étages de compression du turboréacteur pour cisailer une masse de liquide injectée à faible vitesse dans la chambre de combustion. Ainsi, la masse de liquide, qui est initialement sous la forme d'une nappe liquide mince et/ou d'un film liquide mince, se déstabilise et se brise en gouttelettes sous l'action des contraintes aérodynamiques générées par l'écoulement gazeux.

Les principaux avantages liés à ce type d'injecteur sont qu'il nécessite beaucoup moins d'énergie comparé à un injecteur pressurisé pour atomiser une masse de liquide donnée et qu'il permet d'atomiser des débits de carburant beaucoup plus importants. Toutefois, il est nécessaire d'avoir de forts courants gazeux pour que l'injecteur soit capable de fournir une granulométrie satisfaisante ce qui n'est pas toujours possible lorsque le régime du turboréacteur est bas. Pour pallier ce problème, les motoristes ont le plus souvent recouru à des injecteurs pressurisés supplémentaires qui assurent une injection satisfaisante lors des bas régimes du moteur. L'utilisation de ces injecteurs additionnels à l'inconvénient d'entraîner un surcoût de masse important et de complexifier la réalisation et la maintenance des turboréacteurs.

1.3 État de l'art de la simulation numérique de l'atomisation primaire

Dans la littérature, plusieurs travaux concernant le développement de modèles et de codes de calcul permettant de simuler numériquement le processus d'atomisation primaire ont été publiés. Globalement, ces travaux peuvent être classifiés en deux catégories : les approches dites *DNS* et les approches dites « phénoménologiques ».

1.3.1 Les approches *DNS*

Les approches *DNS* (Simulation Numérique Directe, en anglais) désignent ici l'ensemble des approches qui visent à décrire explicitement l'interface gaz-liquide pour toutes les échelles du processus d'atomisation. Les modèles utilisés dans les approches *DNS* sont essentiellement basés sur les équations de Navier-Stokes diphasiques en considérant les écoulements incompressibles. Ces équations sont aussi couplées à un modèle pour décrire la géométrie de l'interface entre les deux fluides. La résolution numérique du système d'équations est très difficile à réaliser en pratique. En effet, le système à résoudre est très mal conditionné à cause de certaines caractéristiques propres à l'écoulement, comme par exemple la présence de forts rapports de densité et de viscosité au niveau de l'interface. Il est donc nécessaire de développer des méthodes numériques robustes qui sont parfois difficiles à mettre en œuvre.

Description de l'interface

La description de l'interface représente une grande difficulté car celle-ci a une topologie très complexe et fait intervenir une large gamme d'échelles au cours du processus d'atomisation. Pour repérer l'interface, deux catégories de méthodes existent :

- ▷ *Le suivi d'interface*, qui consiste à suivre l'interface de façon lagrangienne. On peut citer par exemple la méthode des marqueurs de front [91] avec laquelle l'interface est représentée explicitement par un ensemble de points, nommés marqueurs, connectés entre eux. Ces méthodes peuvent être très précises mais les difficultés liées au traitement des changements de topologie, surtout en 3D, rendent cette classe de méthodes non envisageable pour la simulation de l'atomisation dans des configurations complexes.
- ▷ *La capture d'interface*, qui consiste à repérer l'interface entre deux fluides grâce à un champ scalaire advecté de façon eulérienne dans le domaine. Deux approches se sont imposées dans la littérature : l'approche « Volume Of Fluid » (*VOF*) [48] et l'approche Level Set (*LS*) [68]. L'approche *VOF* consiste à transporter de manière conservative la fraction volumique de chaque fluide dans le domaine, puis à reconstruire l'interface. Quant à l'approche *LS*, elle consiste à transporter la distance signée à l'interface dans le domaine de sorte que l'interface soit identifiée par une isosurface du champ scalaire. La méthode Level-Set fournit une bonne description de la position de l'interface mais elle n'est pas conservative, ce qui peut conduire à des pertes de masse et à la déstabilisation du schéma numérique.

D'autres méthodes dérivant des méthodes citées précédemment ont également été développées pour améliorer la description de l'interface. Par exemple, on peut citer la méthode *CLSVOF*, introduite par Sussman et Puckett [85], qui couple une méthode *VOF* et une méthode *LS* pour garantir la conservation de la masse (grâce au *VOF*) et une bonne description géométrique de l'interface (grâce à la Level-Set).

Exemples de réalisations

Plusieurs travaux ont porté sur la simulation de l'atomisation primaire d'un jet liquide rond. Par exemple, Ménard *et al.* [66] ont développé une méthode couplée *LS/VOF/Ghost Fluid* pour simuler l'atomisation d'un jet diesel (Figure 1.5). Leurs résultats montrent qu'il est possible de reproduire, au moins qualitativement, la désintégration d'un jet liquide. En effet, grâce à une résolution spatiale relativement fine et une méthode de capture d'interface très précise, leurs simulations permettent de reproduire numériquement les mécanismes déstabilisant qui conduisent à la formation de structures ligamentaires et de gouttes (Figure 1.5b). Toutefois, malgré une résolution spatiale importante, la taille des plus petites structures capturées reste dépendante du maillage, comme l'ont souligné Gorokhovski et Herrmann [37]. L'étude d'une configuration similaire a aussi été abordée par Desjardins *et al.* [26] grâce au développement d'une méthode Levet-Set conservative et précise (ACLS).

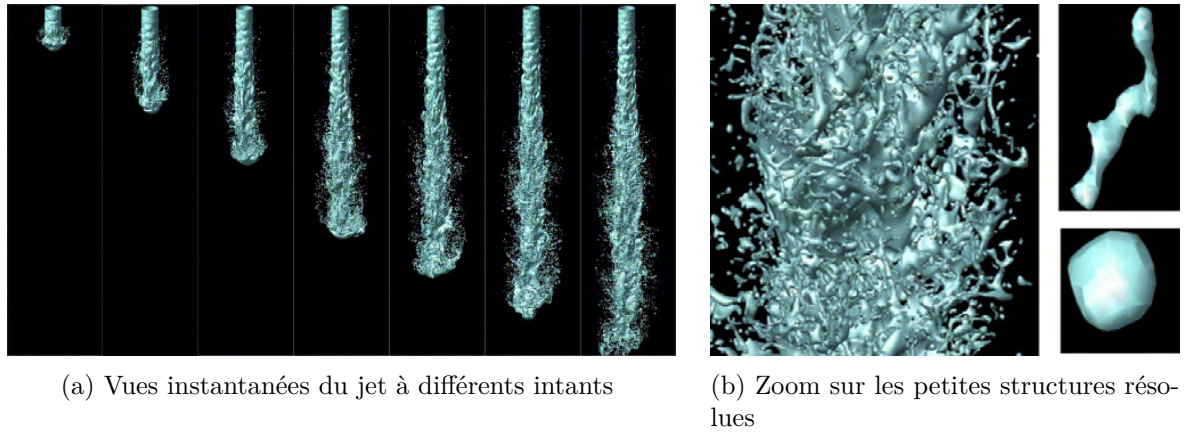


FIGURE 1.5 – Simulation d'un jet liquide Diesel par Ménard *et al.* [66]

La simulation détaillée de l'atomisation primaire d'un jet liquide injecté dans un milieu au repos a aussi été effectuée par Shinjo et Umemura [83] en utilisant une méthode de couplage VOF/LS et une résolution spatiale extrêmement fine (jusqu'à $\Delta x = 0.6\mu m$ pour 6 milliard de points de calcul). En plus de démontrer la performance des outils numériques développés, ces calculs ont permis notamment de mieux comprendre les mécanismes d'instabilités de surface qui conduisent à la formation de ligaments depuis le cœur liquide et depuis la tête du jet en forme de champignon (Figure 1.6). L'utilisation d'une résolution spatiale aussi fine a aussi permis d'analyser l'atomisation secondaire de certaines structures liquides détachées du cœur liquide.

Parmi d'autres études concernant les jets ronds, on peut citer les travaux de Herrmann *et al.* [47] qui ont développé une approche DNS pour étudier l'influence des paramètres caractéristiques de l'écoulement sur l'atomisation primaire d'un jet cisailé par un écoulement latéral (crossflow). Pour cela, ils ont utilisé la méthode *RLSG* [46] qui consiste à utiliser une grille fine pour résoudre le transport de l'interface avec une méthode Levet-Set et une grille non-structurée plus grossière pour résoudre les équations de Navier-Stokes. On citera également les travaux de Fuster *et al.* [33] qui ont utilisé le code GERRIS [73], basé sur une méthode VOF et un raffinement adaptatif de maillage, pour simuler la croissance des instabilités interfaciales d'un jet liquide cisailé par un fort écoulement gazeux.

En ce qui concerne l'étude de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée, on recense moins de travaux publiés comparativement au cas d'un jet liquide rond. Une difficulté supplémentaire intrinsèque au cas d'une nappe liquide cisailée est la présence d'une oscillation globale

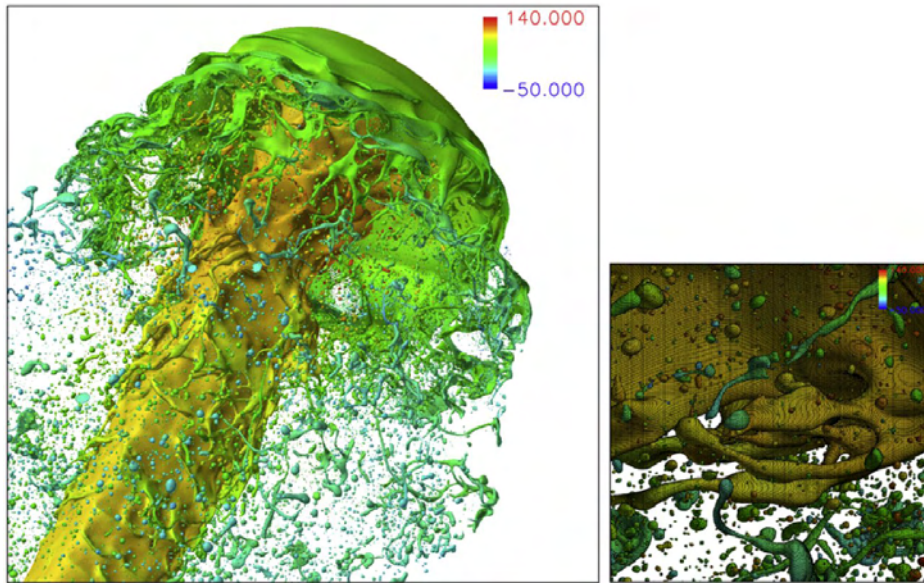


FIGURE 1.6 – Simulation DNS (avec 6 milliard de points de calcul) de l’atomisation primaire d’un jet liquide avec une méthode de couplage VOF/LS [83]

de la nappe qui dépend grandement des paramètres de l’écoulement.

Dans les travaux de Pringuey [75], des simulations de nappes liquides cisailées ont été effectuées avec le code GERRIS [73] et le solveur *interFoam* de la plate-forme OpenFOAM (<http://www.openfoam.org>) qui est basé sur méthode VOF. L’auteur a également développé un nouveau solveur *lesRCLSFoam* dans OpenFOAM basé sur des méthodes numériques mieux adaptées à la simulation de nappes liquides cisailées. Ce solveur est développé pour des fluides incompressibles et le suivi de l’interface est effectué par une nouvelle méthode Levet-Set conservative (RCLS) et un schéma WENO d’ordre élevé. Les résultats obtenus lors de la simulation d’une nappe liquide (voir Figure 1.7) démontrent la robustesse de la méthode générale. De plus, le comportement de la nappe est en bon accord avec les observations expérimentales. D’un point de vue quantitatif, l’estimation de la longueur de rupture moyenne de la nappe est en accord avec une corrélation expérimentale disponible dans la littérature pour une configuration différente. Mais, aucun résultat quantitatif n’est présenté en ce qui concerne la fréquence et l’amplitude de battement de la nappe.

Raessi et Pitsch [77] ont développé une méthode numérique basée sur une méthode Levet-Set conservative pour la capture de l’interface et un schéma consistant pour le transport de la masse et la quantité de mouvement. La robustesse de la méthode numérique a été prouvée sur différents cas tests de transport d’interface jusqu’à des rapports de densité de 10^6 . La méthode a aussi été appliquée à la simulation d’une nappe liquide cisailée afin de montrer le potentiel de celle-ci (cf. Figure 1.8).

À l’ONERA, deux codes de simulations numériques ont été développés pour la simulation directe de l’atomisation de nappes liquides cisailées. Le premier code, nommé DYJEAT et développé par Couderc [21], couple une méthode Level-Set pour la description de l’interface avec un solveur Navier-Stokes incompressible sur des maillages cartésiens structurés. Le second code, nommé DIGIMESH et développé par Zuzio [102], couple une méthode CLSVOF [78] pour la description de l’interface avec un solveur Navier-Stokes incompressible. Le code DIGIMESH utilise également une méthode de raffinement adaptatif de maillage par blocs structurés grâce à la librairie PARAMESH [61]. Ces deux codes ont permis d’effectuer des études paramétriques de l’influence des conditions d’injection sur l’atomisation primaire d’une

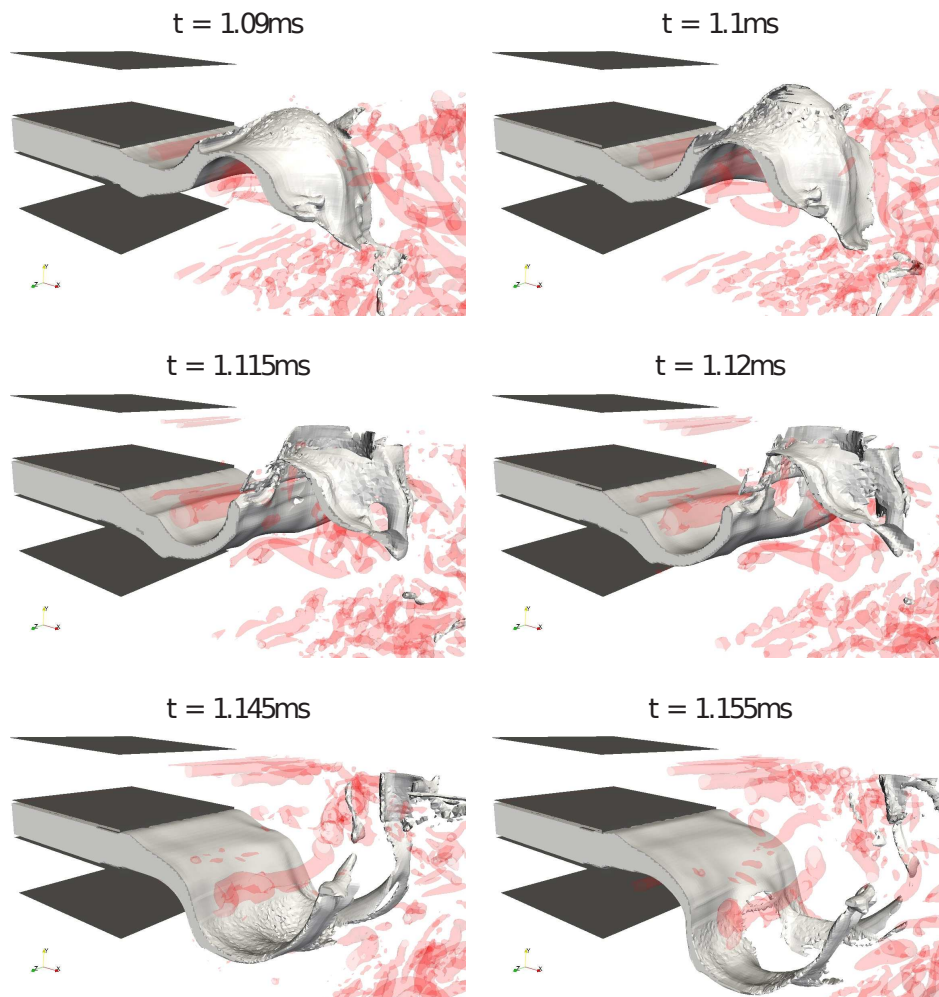


FIGURE 1.7 – Simulation 3D d'une nappe liquide cisailée réalisée avec une méthode Level-Set conservative dans le code OpenFOAM Pringuey [75]

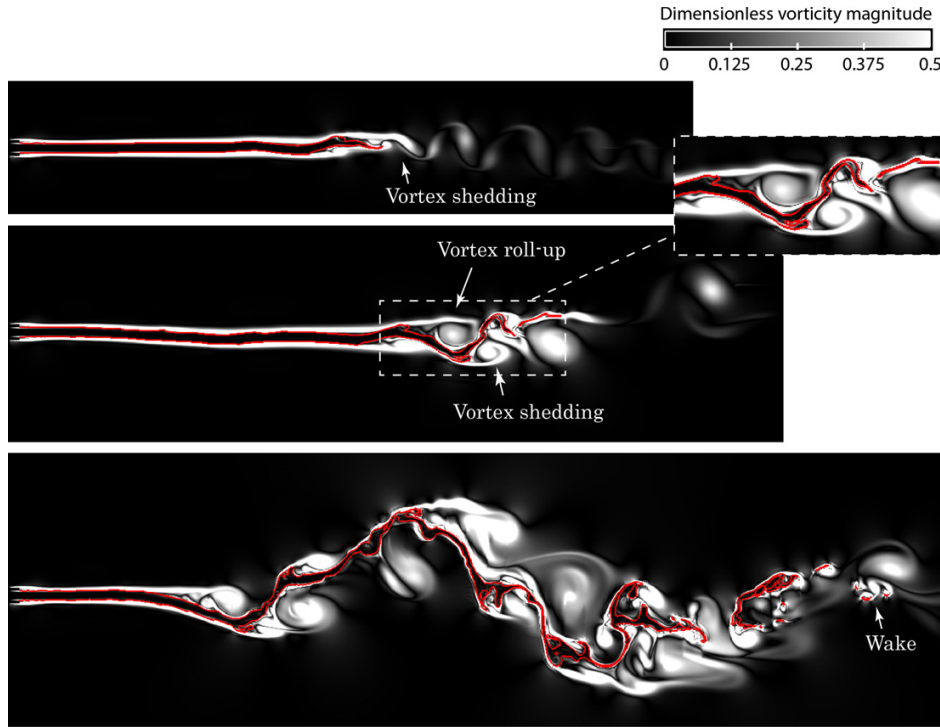


FIGURE 1.8 – Simulation 2D d'une nappe liquide avec une méthode Level-Set conservative par Raessi et Pitsch [77]. Visualisation de l'interaction entre la nappe et l'écoulement gazeux.

nappe liquide plane cisailée pour une configuration 2D simple. Ces études ont notamment permis de montrer une augmentation de la fréquence de battement lorsque la vitesse du gaz injecté augmente. Récemment, des simulations 3D [78] ont aussi été effectuées avec le code DIGIMESH sur une géométrie simplifiée similaire à une configuration expérimentale étudiée à l'ONERA [30]. La Figure 1.9 montre que l'interface résolue présente des instabilités longitudinales et transversales conduisant à la formation de ligaments qui se brisent par la suite sous forme d'amas liquides ou de gouttes. Les mécanismes de déstabilisation de l'interface sont bien reproduits numériquement. Toutefois, les comparaisons quantitatives entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux montrent que la simulation numérique surestime la fréquence de battement de la nappe et sous-estime la longueur de rupture moyenne de la nappe.

1.3.2 Approches dites « phénoménologiques »

1.3.2.1 Les approches stochastiques

Les approches stochastiques ont souvent été utilisées pour simuler le processus d'atomisation secondaire [3, 38]. Ces approches ont été étendues à l'atomisation primaire dans [54] en s'appuyant sur l'hypothèse de la symétrie d'échelles décrite dans [39]. Cette hypothèse est justifiée par le fait que le nombre de Weber, le nombre de Reynolds basé sur l'écoulement gazeux et la fréquence de fragmentation sont très grands pour les applications visées. Le processus d'atomisation peut dans ce cas être considéré comme une cascade de fragmentations.

Jouanguy [53] a appliqué cette méthode pour la simulation de l'atomisation d'un jet liquide cisailé par courant gazeux (cf. Figure 1.10). À partir de l'estimation statistique de la probabilité de présence du cœur liquide (obtenue sous l'hypothèse de symétrie d'échelle)

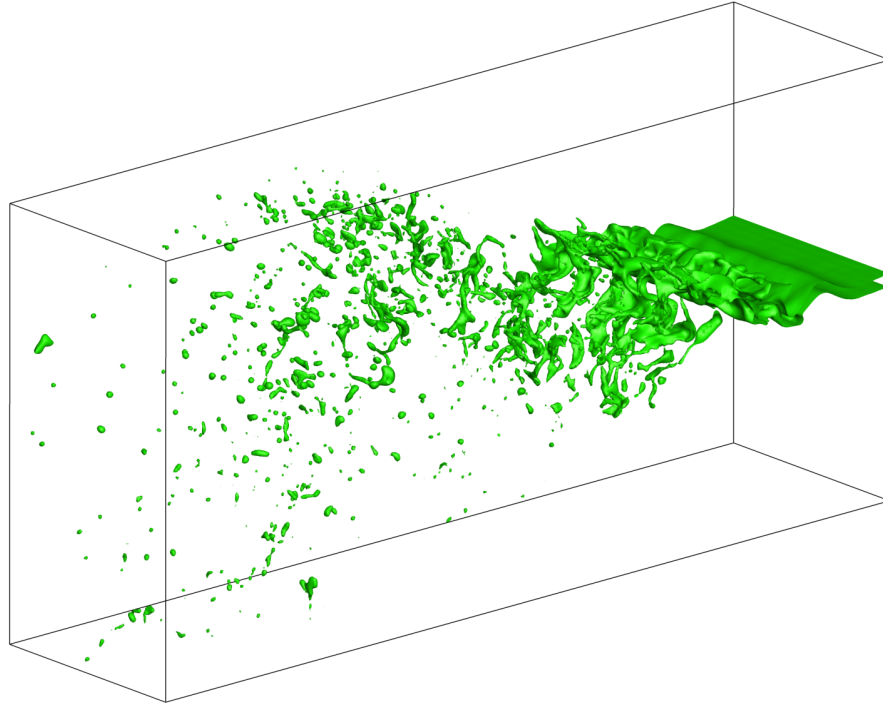


FIGURE 1.9 – Simulation 3D d'une nappe liquide cisailée avec le code DIGIMESH [78]. Visualisation de l'interface gaz/liquide.

à proximité de l'injecteur, des gouttes sont produites en périphérie du cœur liquide en se basant sur une distribution présumée de celles-ci et en assurant la conservation du débit. Les gouttes produites sont ensuite soumises à l'atomisation secondaire (rupture et coalescence) qui est également simulée par un processus stochastique. Les effets aérodynamiques sont pris en compte par couplage entre les gouttes et la phase gazeuse résolue par LES. La résolution de la phase gazeuse prend également en compte la présence du cœur liquide.

Les résultats des simulations de Jouanguy [53] ont montré que cette approche permet de retrouver les comportements physiques observés expérimentalement dans le cas de l'atomisation de type *air-blast* d'un jet liquide, à savoir que l'augmentation du rapport des flux des quantités de mouvement entre les phases conduit à une diminution de la longueur du cœur liquide et de la taille des gouttes produites. Toutefois, l'utilisation de cette approche ne permet pas de reproduire les structures ligamentaires formées suite à l'atomisation primaire. On peut également souligner que la validité d'une telle approche n'a pas été prouvée pour des configurations de nappes liquides cisailées.

1.3.2.2 Modèle ELSA

Le modèle ELSA (*Eulerian Lagrangian Spray Atomization*) a initialement été développé par Vallet et Borghi [95], puis repris par Blokkeel *et al.* [10], pour modéliser l'atomisation d'un spray. Le principe de ce modèle consiste à décrire les zones denses (proche de l'injecteur) avec une approche eulérienne qui est plus adaptée à la description des interactions fortes entre l'écoulement gazeux et le cœur liquide. Lorsque le spray devient suffisamment dilué (en aval de l'injecteur), une approche lagrangienne est ensuite adoptée.

La formulation eulérienne des zones denses est effectuée en considérant le milieu diphasique comme un seul fluide à masse volumique fortement variable. Ainsi, la dispersion de la

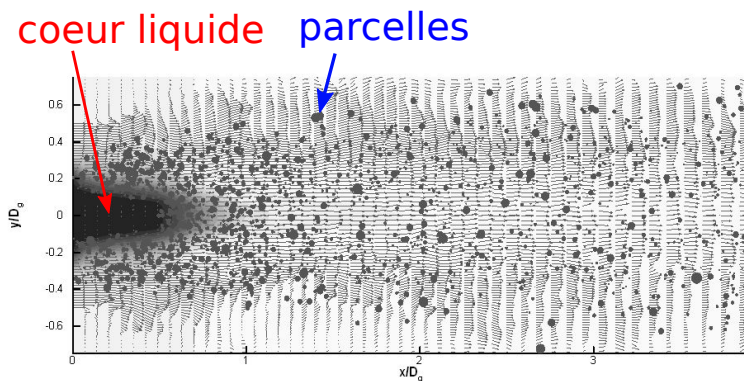


FIGURE 1.10 – Simulation stochastique de l'atomisation d'un jet liquide cisailé par courant gazeux : visualisation de la probabilité de présence du cœur liquide et du transport des parcelles (population de gouttes) dans le champs de gaz résolu avec une LES, extrait de [53]

phase liquide est décrite par une équation de transport pour la fraction massique moyenne de liquide avec une formulation de type RANS.

L'aspect clé de ce modèle réside dans la description de l'évolution de la densité moyenne d'interface en utilisant une équation supplémentaire. Le transport de cette quantité et de la fraction massique moyenne permet de connaître localement la taille des gouttes produites par atomisation. Toutefois, l'une des principales difficultés concerne la fermeture de cette équation qui nécessite notamment de modéliser des termes de production (étirement) et de destruction (coalescence) de l'interface qui dépendent de mécanismes complexes.

1.4 Approche retenue pour la modélisation de l'atomisation assistée

Notre objectif étant le développement d'une méthode pouvant s'intégrer dans un code capable de simuler l'ensemble des processus physiques présents dans une chambre de combustion, il apparaît clairement que les approches de type DNS ne sont pas encore assez avancées et la puissance des supercalculateurs suffisante pour que cette solution soit applicable à court terme. Nous avons donc décidé d'opter pour une approche de type multi-échelle basée sur le couplage d'un modèle bifluide adapté à la simulation des grandes échelles caractérisant la dynamique du cœur liquide et d'un modèle de spray bien mieux adapté à la description de la phase liquide une fois celle-ci fragmentée sous la forme de fines inclusions dispersées dans le champ gazeux. De ce point de vue, notre méthodologie est relativement proche du modèle ELSA, si ce n'est l'absence d'équation de transport de la densité d'interface dans notre cas et le fait que l'approche ELSA a pour l'instant principalement été développée pour la modélisation de jets ronds débouchant dans un écoulement au repos pour lesquels les mécanismes d'atomisation sont différents de ceux des nappes cisillées.

L'ONERA disposant avec CEDRE d'un code compressible multi-composant et multi-physique, déjà capable de reproduire tous les phénomènes présents dans un foyer de combustion à l'exception de l'atomisation primaire, il nous a également semblé important que le modèle permettant de simuler le cœur liquide puisse facilement y être intégré, ce qui nous a conduit à nous orienter vers un modèle sans reconstruction implicite de l'interface et dans lequel les deux phases sont traitées de manière symétrique et comme des fluides compressibles. Plutôt que de réaliser nos développements directement dans CEDRE, nous avons préféré les faire dans le code de recherche SLOSH dont la structure est beaucoup plus simple mais qui

dans son principe peut être vu comme un prototype de CEDRE.

Chapitre 2

Modèle bifluide pour la description du cœur liquide

Sommaire

2.1	Formulation du modèle	36
2.1.1	Hypothèses de modélisation	36
2.1.2	Équations générales	37
2.1.2.1	Notion de grandeur moyenne phasique	37
2.1.2.2	Conservation de la masse	38
2.1.2.3	Conservation de la quantité de mouvement	38
2.1.2.4	Fermeture du modèle à deux fluides	39
2.1.3	Modélisation des effets capillaires	41
2.1.4	Formulation finale du modèle	42
2.2	Discrétisation du modèle	42
2.2.1	Notations	42
2.2.2	Méthode de calcul des gradients discrets	43
2.2.2.1	Principe de la méthode des moindres carrés pour le calcul d'un gradient discret.	45
2.2.2.2	Principe de la méthode des moindres carrés pour l'interpolation en un point	46
2.2.2.3	Calcul des gradients discrets dans les cellules	47
2.2.2.4	Calcul des gradients discrets sur les faces	47
2.2.3	Expression générale du schéma de discrétisation	48
2.2.4	Discrétisation des flux liés à la partie hyperbolique des équations	50
2.2.4.1	Remarques sur le caractère Bas-Mach des écoulements étudiés	50
2.2.4.2	Schéma bas-Mach	51
2.2.5	Discrétisation du tenseur capillaire	52
2.2.6	Discrétisation du tenseur visqueux	52
2.2.7	Discrétisation du terme de gravité	53
2.2.8	Extension du schéma Bas-Mach à l'ordre 2 en espace	53
2.2.8.1	Principe de la méthode MUSCL dans le cas général	53
2.2.8.2	Développement d'un limiteur compressif	54
2.2.8.3	Application au transport d'une discontinuité	61
2.2.8.4	Limiteur retenu pour le modèle bifluide	67
2.2.9	Résolution numérique du système discret	67
2.3	Conclusion du chapitre	70

L'objet de ce chapitre est de décrire le modèle numérique utilisé pour la simulation du cœur liquide continu. Ce modèle, basé sur les travaux de Chantepredrix [15], doit permettre de reproduire avec précision les mécanismes physiques conduisant à la déstabilisation et à la fragmentation primaire d'une nappe liquide cisailée par de forts écoulements gazeux.

2.1 Formulation du modèle

2.1.1 Hypothèses de modélisation

Dans la zone d'atomisation primaire, l'écoulement est caractérisé par la présence de deux fluides compressibles, visqueux et non-miscibles. Cette étude étant axée sur la description des effets liés à la dynamique de l'atomisation, tous les effets thermiques ne sont pas pris en compte dans la modélisation. Ainsi, les fluides sont considérés comme des fluides barotropes où la pression p_k et la masse volumique ρ_k du fluide k ($k = g$ pour le gaz, $k = l$ pour le liquide) sont liées par la relation :

$$p_k = p_k(\rho_k) \quad (2.1)$$

où p_k est la loi d'état du fluide k . Sachant que les écoulements sont à faible nombre de Mach dans les applications visées, la variation relative de la masse volumique de chaque fluide est considérée très faible. Il est alors possible de modéliser le comportement de chaque fluide par une loi d'état linéarisée autour d'un état de référence, correspondant au couple $(\rho_{0,k}, p_{0,k})$ pour le fluide k . La loi d'état ainsi obtenue pour chaque fluide a pour expression :

$$p_k = p_{0,k} + c_k^2 (\rho_k - \rho_{0,k}) \quad (2.2)$$

où c_k est la vitesse du son constante dans le fluide k .

Il est important de noter que le choix de la loi d'état (2.2) est motivé par des considérations physiques sur la nature des écoulements étudiés (faiblement compressibles et isothermes) et qu'il n'est pas imposé par des restrictions liées au modèle. En effet, le modèle bifluide présenté dans ce chapitre reste valide pour d'autres types de lois d'état (par exemple, celle du gaz parfait).

L'hypothèse de non-miscibilité implique que physiquement seul un fluide peut être présent localement en tout point de l'espace considéré. Les deux fluides sont donc séparés par une interface dont l'épaisseur est négligeable devant les échelles macroscopiques de l'écoulement et à travers laquelle les propriétés du milieu changent de manière discontinue. Cependant, la résolution numérique de cette discontinuité sur un maillage s'avère très difficile à effectuer du fait que toute discrétisation spatiale conduit à un filtrage spatial qui tend à épaissir l'interface. Cet épaississement est accentué par la diffusion numérique inhérente à tous les schémas décentrés. Pour cette raison, une formulation de type *interface diffuse* qui suppose que les deux phases peuvent coexister à l'échelle macroscopique en tout point de l'espace a été retenue. L'interface est donc traitée comme une zone de transition entre une zone où le taux de présence du liquide est très proche de l'unité et une zone où le taux de présence du gaz est très proche de l'unité. En pratique, l'épaisseur de la transition est généralement de quelques mailles. Le taux de présence du fluide k est caractérisé par sa fraction volumique α_k . Les fluides étant supposés occuper tout l'espace (contrainte de saturation), les fractions volumiques du gaz α_g et du liquide α_l doivent vérifier :

$$\alpha_g + \alpha_l = 1 \quad (2.3)$$

Le modèle retenu suppose également l'absence de glissement local entre les deux fluides. En d'autres termes, cette hypothèse revient à considérer que la vitesse du gaz \mathbf{v}_g et la vitesse du liquide \mathbf{v}_l sont identiques localement. On peut alors définir la vitesse locale \mathbf{v} du pseudo-mélange des deux fluides :

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_g = \mathbf{v}_l \quad (2.4)$$

Pour un écoulement à phases séparées, l'hypothèse de non-glissement entre les deux fluides n'a aucune implication loin de l'interface car le volume y est entièrement occupé par un seul fluide. L'hypothèse de non-glissement ne rentre en jeu que dans une zone réduite au niveau de l'interface entre les deux fluides car celle-ci est traitée comme une zone de mélange.

Dans les applications visées, les effets liés à la turbulence de l'écoulement peuvent avoir un rôle non-négligeable. La modélisation de la turbulence pour un écoulement en présence d'une interface gaz-liquide reste encore une problématique ouverte qui fait l'objet de nombreuses recherches [2, 60, 90, 89, 98]. Toutefois, cette problématique ne s'inscrit pas dans le cadre de cette thèse : la modélisation des échelles de sous-maille, c'est-à-dire des échelles non résolues, n'est donc pas abordée dans la suite du manuscrit. Par conséquent, le modèle retenu est formulé comme si les écoulements étudiés étaient laminares ou encore comme si la résolution spatiale utilisée lors des simulations numériques était suffisamment fine pour décrire l'ensemble des échelles de l'écoulement. En pratique, comme ce ne sera pas le cas, on suppose implicitement que la dissipation intrinsèque du schéma numérique permet d'assurer la dissipation des plus petites échelles de l'écoulement comme le ferait un modèle de sous-maille. Cette approche est similaire à la méthode *MILES* (Monotone Integrated Large Eddy Simulation) [11, 32].

2.1.2 Équations générales

2.1.2.1 Notion de grandeur moyenne phasique

Le modèle développé est basé sur une description eulérienne et continue des grandeurs moyennes volumiques associées à l'écoulement à deux fluides. Il est donc nécessaire de décrire comment sont définies les grandeurs moyennes volumiques.

On considère un volume de contrôle fixe Ω . La fraction volumique α_k d'un fluide k peut alors s'interpréter comme une moyenne volumique locale de la fonction indicatrice de phase χ_k définie telle que :

$$\chi_k = \begin{cases} 1 & \text{dans le fluide } k \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.5)$$

Sur le volume Ω , on a alors :

$$\alpha_k = \langle \chi_k \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \chi_k d\Omega = \frac{|\Omega_k|}{|\Omega|} \quad (2.6)$$

où Ω_k est le volume occupé par le fluide k dans Ω

Si on considère une grandeur phasique q_k liée aux propriétés du fluide k (par exemple, la densité volumique de masse ρ_k) et définie uniquement dans le domaine Ω_k occupé par le fluide k , il est alors possible de lui associer une grandeur phasique $(\chi_k q_k)$ dont la définition est étendue à l'ensemble du domaine physique quelque soit la phase présente localement. De plus, leurs moyennes volumiques vérifient :

$$\langle \chi_k q_k \rangle_\Omega = \alpha_k \langle q_k \rangle_{\Omega_k} \quad (2.7)$$

Le modèle a été développé en se basant sur l'écriture des lois de conservation des grandeurs moyennes volumiques. Toutefois la notation $\langle \cdot \rangle$ est omise afin d'alléger l'écriture des équations.

2.1.2.2 Conservation de la masse

Afin d'écrire les équations de conservation de la masse pour chaque fluide, on définit la *densité volumique de masse* $\tilde{\rho}_k$ du fluide k :

$$\tilde{\rho}_k = \rho_k \alpha_k \quad (2.8)$$

L'équation du bilan de conservation de la masse associée, appliqué à un domaine fixe Ω , s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \tilde{\rho}_k d\Omega = - \int_{\partial\Omega} \tilde{\rho}_k \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.9)$$

où $\partial\Omega$ est la surface fermée délimitant Ω , \mathbf{n} désigne la normale à un élément de surface dS de $\partial\Omega$ pointant vers l'extérieur de Ω , et \mathbf{v}_k est la vitesse du fluide k .

Ce qui conduit à l'équation locale :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}_k) + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_k \mathbf{v}_k) = 0 \quad (2.10)$$

En prenant en compte l'hypothèse de non-glissement local entre les fluides, on obtient finalement les équations locales de conservation de la masse pour le gaz et le liquide :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}_g) + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_g \mathbf{v}) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}_l) + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_l \mathbf{v}) = 0 \end{cases} \quad (2.11)$$

2.1.2.3 Conservation de la quantité de mouvement

On définit la densité volumique de masse du mélange gaz-liquide :

$$\rho = \tilde{\rho}_g + \tilde{\rho}_l \quad (2.12)$$

Compte-tenu de l'hypothèse de non-glissement entre les deux fluides, l'écriture d'une seule équation de bilan de quantité de mouvement pour le mélange des deux fluides suffit pour calculer la vitesse des fluides $\mathbf{v} = \mathbf{v}_g = \mathbf{v}_l$.

Si on applique le principe fondamental de la dynamique au mélange des deux fluides, il vient :

$$\rho \frac{d}{dt}(\mathbf{v}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}_c + \mathbf{f}_{ext} \quad (2.13)$$

où $\boldsymbol{\tau}$ désigne le tenseur des contraintes lié aux actions de surface, \mathbf{f}_c la densité volumique des forces capillaires qui s'exercent au niveau de l'interface entre les deux fluides, et \mathbf{f}_{ext} la densité volumique des forces extérieures. Dans le cas d'un mélange de fluides visqueux, on a :

$$\boldsymbol{\tau} = -p\mathbb{I} + \boldsymbol{\tau}_v \quad (2.14)$$

où p et $\boldsymbol{\tau}_v$ sont respectivement la pression du mélange et le tenseur des contraintes visqueuses du mélange qui seront définis lors de la fermeture du modèle au §2.1.2.4. Selon les applications

visées dans ces travaux, le terme des forces extérieures prend en compte les forces liées à l'accélération gravitationnelle \mathbf{g} . On a donc :

$$\mathbf{f}_{ext} = \rho \mathbf{g} \quad (2.15)$$

Finalement le bilan de quantité de mouvement appliqué au mélange s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbb{I}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_v) + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_c \quad (2.16)$$

2.1.2.4 Fermeture du modèle à deux fluides

Pour fermer le modèle (2.11)-(2.16), il est nécessaire de définir certaines quantités associées au mélange des deux fluides. Pour cela, on introduit une *loi de mélange* qui permet de déterminer les quantités liées au mélange à partir des quantités liées à chaque fluide. Cette loi de mélange doit être choisie de sorte que le modèle possède les deux propriétés suivantes :

- P1 : **Consistance** : Le modèle à deux fluides doit dégénérer correctement vers un modèle de Navier-Stokes monophasique lorsqu'un seul fluide est présent localement ou lorsque les deux fluides ont les mêmes propriétés.
- P2 : **Stabilité** : Le modèle à deux fluides doit être compatible avec le second principe de la thermodynamique, c'est-à-dire d'un point de vue mathématique posséder une entropie au sens de Lax. Cette propriété garantit en particulier que le système obtenu en éliminant le second membre du système (2.11)-(2.16) est hyperbolique.

En notant ϕ_m la quantité liée au mélange et ϕ_k la quantité liée au fluide k , la loi de mélange retenue est la suivante :

$$\boxed{\phi_m = \sum_k \alpha_k \phi_k} \quad (2.17)$$

Par construction, toute quantité liée au mélange définie par la loi de mélange (2.17), vérifie bien la contrainte de consistance [P1] concernant la dégénérescence du modèle vers le cas monophasique. Toutefois, cette loi de mélange a l'inconvénient d'être basée sur une pondération par la fraction volumique qui n'est pas une inconnue directe du modèle (2.11)-(2.16). Il est donc nécessaire de se donner une seconde loi de fermeture permettant de calculer les fractions volumiques α_l et α_g connaissant l'état thermodynamique local des deux fluides.

Dans [15], l'auteur a montré qu'une loi de fermeture basée sur l'hypothèse de l'équilibre local des pressions entre les deux fluides, c'est-à-dire $p_g = p_l$, permet d'assurer la stabilité [P2] du modèle (2.11)-(2.16). Cette hypothèse de fermeture isobare a donc été retenue. Pour des fluides barotropes, cet équilibre local des pressions permet de déterminer de façon unique la fraction volumique d'équilibre α_k^* pour chaque fluide k en résolvant le système algébrique suivant :

$$\boxed{\begin{cases} p_g \left(\frac{\tilde{\rho}_g}{\alpha_g^*} \right) = p_l \left(\frac{\tilde{\rho}_l}{\alpha_l^*} \right) \\ \alpha_l^* + \alpha_g^* = 1 \end{cases}} \quad (2.18)$$

En d'autres termes, le système algébrique (2.18) permet de définir un unique couple solution (α_g^*, α_l^*) pour un couple $(\tilde{\rho}_g, \tilde{\rho}_l)$ donné.

Définition de la pression de mélange :

Dans l'équation (2.16) du bilan de quantité de mouvement du mélange, on a introduit la notion de pression de mélange. Elle peut s'écrire d'après la loi de mélange (2.17) :

$$p = \alpha_g^* p_g + \alpha_l^* p_l \quad (2.19)$$

où p_g et p_l désignent respectivement les pressions dans la phase gaz et la phase liquide et où α_g^* et α_l^* sont solutions de (2.18). On a donc également :

$$p(\tilde{\rho}_g, \tilde{\rho}_l) = p_g \left(\frac{\tilde{\rho}_g}{\alpha_g^*(\tilde{\rho}_g, \tilde{\rho}_l)} \right) = p_l \left(\frac{\tilde{\rho}_l}{\alpha_l^*(\tilde{\rho}_g, \tilde{\rho}_l)} \right) \quad (2.20)$$

*Dans la suite du manuscrit, sauf ambiguïté, on omettra l'exposant « * » pour désigner les fractions volumiques d'équilibre des pressions. On notera donc simplement α_l et α_g les solutions de (2.18).*

Définition du tenseur des contraintes visqueuses du mélange :

Le tenseur des contraintes visqueuses du mélange a été introduit dans l'équation (2.16) du bilan de quantité de mouvement du mélange. D'après la loi de mélange, celui-ci peut s'écrire :

$$\boldsymbol{\tau}_c = \alpha_g \boldsymbol{\tau}_{c,g} + \alpha_l \boldsymbol{\tau}_{c,l} \quad (2.21)$$

où $\boldsymbol{\tau}_{c,g}$ et $\boldsymbol{\tau}_{c,l}$ désignent respectivement le tenseur des contraintes visqueuses dans le gaz et dans le liquide.

En considérant que chaque fluide k (avec $k = l, g$) se comporte comme un fluide newtonien (avec l'hypothèse de Stokes), on a :

$$\boldsymbol{\tau}_{c,k} = 2\mu_k \mathbf{d}_k - \frac{2}{3}\mu_k (\nabla \cdot \mathbf{v}_k) \mathbb{I} \quad (2.22)$$

où \mathbf{d}_k est le tenseur des taux de déformation :

$$\mathbf{d}_k = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v}_k + {}^t \nabla \mathbf{v}_k \right) \quad (2.23)$$

En utilisant une nouvelle fois l'hypothèse d'équilibre local des vitesses, on remarque que le tenseur des taux de déformation est identique dans chaque fluide ($\mathbf{d} = \mathbf{d}_g = \mathbf{d}_l$). De plus, le second terme dépendant de la divergence de la vitesse du fluide dans l'expression (2.22) sera négligé car les applications visées concernent des écoulements à faible nombre de Mach où les effets de compressibilité ne sont pas prépondérants.

Finalement, le tenseur des contraintes visqueuses dans le fluide k s'écrit :

$$\boldsymbol{\tau}_{c,k} = \mu_k \left(\nabla \mathbf{v} + {}^t \nabla \mathbf{v} \right) \quad (2.24)$$

En substituant (2.24) dans (2.21), on en déduit que le tenseur des contraintes visqueuses du mélange s'écrit :

$$\boldsymbol{\tau}_c = \mu \left(\nabla \mathbf{v} + {}^t \nabla \mathbf{v} \right) \quad (2.25)$$

où on a introduit la viscosité dynamique du mélange μ définie par :

$$\mu = \alpha_g \mu_g + \alpha_l \mu_l \quad (2.26)$$

2.1.3 Modélisation des effets capillaires

Les effets capillaires trouvent leurs origines au niveau microscopique. À l'intérieur d'un fluide, chaque molécule est soumise à des forces d'attraction/répulsion de type Van der Waals de la part des molécules voisines. La résultante de ces forces est nulle en moyenne car elles se compensent par symétrie. Au niveau d'une interface entre deux fluides non-miscibles, une molécule interagit avec les molécules des deux fluides avec des intensités différentes selon le fluide auquel appartient la particule voisine. Cette dissymétrie conduit à une force résultante non-nulle en moyenne. À l'échelle macroscopique et d'un point de vue mécanique, ce phénomène se traduit par l'existence d'une force de tension de surface qui aura tendance à minimiser l'aire de l'interface afin de minimiser la valeur de l'énergie potentielle d'interaction entre une molécule et ses voisines (qui, dans le cas d'un liquide et d'un gaz, est plus faible pour une molécule d'eau entourée de molécules d'eau que pour une molécule d'eau à l'interface).

Dans de nombreux travaux, comme par exemple [14, 44, 52], les effets capillaires entre deux fluides non-miscibles sont modélisés du point de vue macroscopique par l'introduction d'une force volumique. Ceci revient à rajouter un terme supplémentaire dans l'équation de quantité de mouvement. L'expression classique de la force capillaire par unité de volume est :

$$\mathbf{f}_c = \sigma \kappa \delta_I \mathbf{n}_I \quad (2.27)$$

où :

- σ est le coefficient de tension de surface ($N.m^{-1}$).
- κ est la courbure locale de l'interface (m^{-1}).
- δ_I est la fonction de Dirac centrée sur l'interface.
- \mathbf{n}_I est la normale à l'interface.

La formulation (2.27) est adaptée aux méthodes de suivi d'interface ou aux méthodes Level-Set qui décrivent explicitement la position et la forme locale de l'interface mais, sous cette forme, elle n'est pas adaptée à une formulation de type interface diffuse sans reconstruction explicite de l'interface. Pour cette raison, il est préférable d'utiliser un modèle basé sur une formulation continue comme le modèle CSF (Continuum Surface Force [14]) :

$$\mathbf{f}_c = -\sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \right) \nabla \alpha \quad (2.28)$$

Le modèle CSF (2.28) est une approximation du modèle (2.27) avec :

$$\mathbf{n}_I \simeq \frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \quad (2.29)$$

$$\delta_I \simeq \|\nabla \alpha\| \quad (2.30)$$

$$\kappa \simeq -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \right) \quad (2.31)$$

L'expression (2.28) du modèle CSF est adaptée à un formalisme à interface diffuse dans lequel l'interface est supposée être étalée sur quelques mailles mais elle présente l'inconvénient de ne pas être formulée sous forme conservative. On utilise alors à la place une formulation équivalente de ce modèle écrite sous une forme conservative :

$$\mathbf{f}_c = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_c \quad (2.32)$$

avec :

$$\boldsymbol{\tau}_c = \sigma \left[\mathbb{I} - \frac{\nabla \alpha \otimes \nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|^2} \right] \|\nabla \alpha\| \quad (2.33)$$

Remarque 1

Le modèle utilisant la formulation (2.33) du modèle CSF est parfois appelé modèle CSS (Continuum Surface Stress [42]) mais on peut démontrer que les formulations (2.28) et (2.33) sont équivalentes mathématiquement (voir par exemple [15]).

2.1.4 Formulation finale du modèle

Avant d'entreprendre la résolution numérique des équations du modèle, on reformule celui-ci sous la forme d'un système condensé afin d'en donner une vision globale. On définit le vecteur des variables conservatives \mathbf{w} du système (2.11)-(2.16) :

$$\mathbf{w} = {}^t(\tilde{\rho}_g, \tilde{\rho}_l, \rho \mathbf{v}) \quad (2.34)$$

De même, on peut définir le vecteur des variables primitives \mathbf{u} :

$$\mathbf{u} = {}^t(\rho_g, \rho_l, \alpha_g, \mathbf{v}) \quad (2.35)$$

(avec $\alpha_l = 1 - \alpha_g$)

Le système d'équations du modèle bifluide s'écrit :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{H} = \nabla \cdot (\mathcal{C} + \mathcal{V}) + \mathbf{s}_g \quad (2.36)$$

où $\mathcal{H}, \mathcal{C}, \mathcal{V}, \mathbf{s}_g$ sont définis par :

$$\mathcal{H} = \begin{Bmatrix} \tilde{\rho}_g \mathbf{v} \\ \tilde{\rho}_l \mathbf{v} \\ \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbf{I} \end{Bmatrix}, \quad \mathcal{C} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ \tau_c \end{Bmatrix}, \quad \mathcal{V} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ \tau_v \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{s}_g = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho \mathbf{g} \end{Bmatrix} \quad (2.37)$$

2.2 Discrétisation du modèle

Dans ce paragraphe, les méthodes numériques utilisées pour la résolution du modèle cœur-liquide sont décrites. On se base sur une discrétisation volumes finis sur maillages tri-dimensionnels non-structurés.

2.2.1 Notations

On souhaite résoudre le système d'équations (2.36) sur un domaine physique Ω avec une approche volumes-finis. La première étape consiste à subdiviser le domaine de calcul en \mathcal{N}_c volumes de contrôle disjoints. Les volumes de contrôle, aussi appelés cellules ou mailles, sont des polyèdres convexes dans le cas de maillages non-structurés généraux. Dans le cadre de la thèse, on se restreint au cas où chaque face d'un polyèdre est définie par un ensemble de sommets coplanaires de sorte qu'il ne soit pas nécessaire de triangulariser les faces. L'ensemble des cellules $\{\Omega_i\}_{i \in \llbracket 1; \mathcal{N}_c \rrbracket}$ du maillage vérifie :

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^{\mathcal{N}_c} \Omega_i \quad (2.38)$$

Pour chaque cellule Ω_i du maillage, on note \mathbf{G}_i son centre de gravité défini par :

$$\mathbf{G}_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \mathbf{x} \, d\Omega \quad (2.39)$$

où $|\Omega_i|$ désigne le volume de la cellule Ω_i . On note $\mathcal{E}_{P,i} = \{P_{i_1}, \dots, P_{i_n}\}$ l'ensemble des n sommets de la cellule Ω_i .

La face commune à deux cellules Ω_i et Ω_j est notée Γ_{ij} (ou Γ_{ji}). On a :

$$\Gamma_{ij} = \partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j \quad (2.40)$$

On note \mathbf{n}_{ij} le vecteur normal unitaire à la face Γ_{ij} orienté de la cellule Ω_i vers la cellule Ω_j . Par définition, on a $\mathbf{n}_{ij} = -\mathbf{n}_{ji}$. Le centre de gravité B_{ij} de la face Γ_{ij} est défini par (2.41). On note I_{ij} le point d'intersection de la droite $(G_i G_j)$ avec la face Γ_{ij} .

$$B_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{x} \, d\Gamma \quad (2.41)$$

L'ensemble des notations est représenté sur la Figure 2.1.

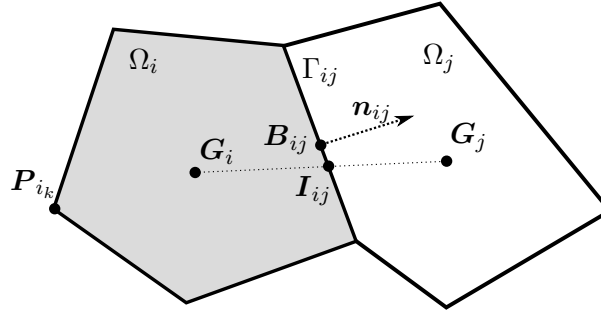


FIGURE 2.1 – Notations associées à une cellule Ω_i et une de ses voisines Ω_j .

Conditions aux limites :

Les conditions aux limites sont traitées d'un point de vue numérique en utilisant des cellules fictives situées au bord du domaine et dans lesquelles on impose certaines conditions sur les valeurs des variables (conditions de type Dirichlet) ou sur les dérivées des variables (conditions de type Neumann). Ces cellules fictives sont appelées *cellules limites* et les faces qui constituent la frontière du domaine de simulation sont appelées *faces limites*. À chaque face limite, on associe une cellule limite construite en effectuant une symétrie de la cellule interne par rapport à la face limite considérée (voir Figure 2.2).

Définition des voisinages :

La formulation discrète des opérateurs mathématiques sur un maillage nécessite de définir plusieurs notions de voisinage entre les éléments du maillage. On définit :

- ▷ le voisinage de faces $\mathcal{V}_f(i)$ de la cellule Ω_i contenant l'ensemble des indices j tels que les cellules Ω_i et Ω_j aient une face en commun.
- ▷ le voisinage de sommets $\mathcal{V}_s(i)$ de la cellule Ω_i contenant l'ensemble des indices j tels que les cellules Ω_i et Ω_j aient au moins un sommet en commun :

Comme l'illustre la Figure 2.3, on remarque que : $\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \mathcal{V}_f(i) \subset \mathcal{V}_s(i)$.

2.2.2 Méthode de calcul des gradients discrets

Le calcul des gradients discrets de la solution discrète est habituellement effectué par deux catégories de méthodes :

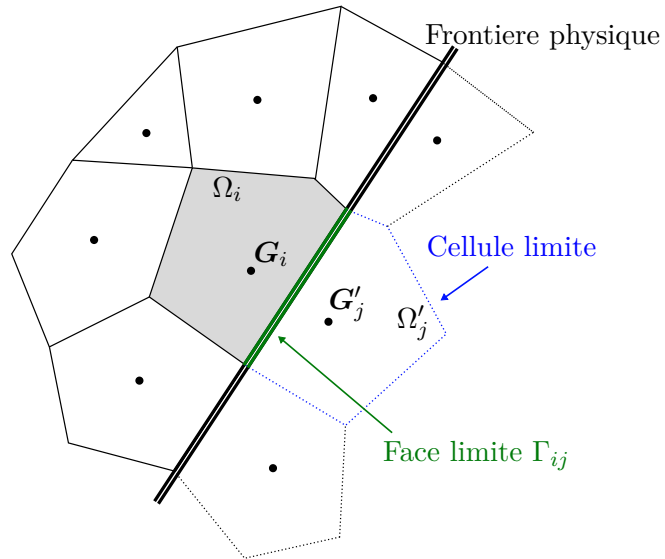


FIGURE 2.2 – Définition des cellules limites.

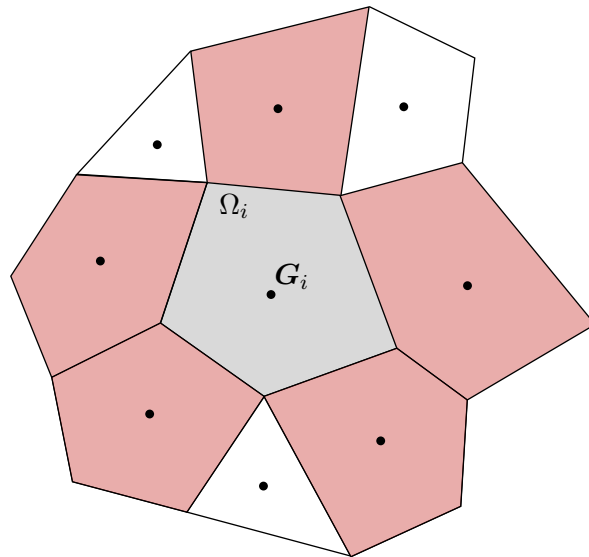


FIGURE 2.3 – Définition des voisinages de faces et de sommets pour une cellule Ω_i (grisée). L'ensemble $\mathcal{V}_f(i)$ contient les indices des cellules voisines colorées en rouge. L'ensemble $\mathcal{V}_s(i)$ contient les indices des cellules voisines colorées en rouge et des cellules voisines non-colorées.

- ▷ La méthode de Green-Gauss
- ▷ La méthode des moindres carrés

La méthode de Green-Gauss repose sur l'application du théorème de Green-Ostrogradski qui conduit à la relation (2.42). C'est une méthode qui peut être précise sur des maillages non-structurés généraux, même de mauvaise qualité, dans le cas où elle est couplée avec un processus itératif de prédiction-correction du gradient pour prendre en compte la non-orthogonalité du maillage [4]. Toutefois, le coût de cette méthode est relativement élevé en terme de calcul. Pour cette raison la méthode des moindres carrés a été retenue car elle offre un cadre générique plus facile à mettre en œuvre pour des maillages non-structurés généraux et moins coûteux en terme de calcul. On notera néanmoins que cette méthode peut être moins précise dans un cas où le maillage est très étiré (typiquement dans une couche limite) comme l'a rapporté Mavriplis [63].

$$\int_{\Omega} \nabla q \, d\Omega = \oint_{|\partial\Omega|} q \, \mathbf{n} \, d\Gamma \quad (2.42)$$

Les deux paragraphes suivants présentent le principe général de l'approximation du gradient et de l'interpolation par la méthode des moindres carrés. On présente ensuite comment cette méthode est appliquée pour le calcul des gradients discrets aux centres des cellules et aux centres des faces.

2.2.2.1 Principe de la méthode des moindres carrés pour le calcul d'un gradient discret.

On considère une solution discrète $\{q_j\}_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket}$ connue sur un ensemble de N points \mathbf{M}_j , $j \in \llbracket 1, N \rrbracket$, de coordonnées $\mathbf{X}_j = {}^t(x_j, y_j, z_j)$. On cherche à évaluer le gradient discret ∇q_i de la solution discrète q au point \mathbf{M}_i de coordonnées $\mathbf{X}_i = {}^t(x_i, y_i, z_i)$. Dans un voisinage $\mathcal{V}_0(i) \in \mathbb{R}^d$ (ici $d = 3$) autour d'un point i , on définit le modèle affine \hat{q}_i suivant :

$$\forall \mathbf{M} \in \mathcal{V}_0(i), \quad \hat{q}_i(\mathbf{M}) = q_i + \nabla q_i \cdot \mathbf{M} \mathbf{M}_i \quad (2.43)$$

L'ajustement de ce modèle par la méthode des moindres carrés consiste alors à chercher la valeur optimale du gradient discret ∇q_i au point \mathbf{M}_i qui minimise la somme S_i :

$$S_i = \sum_{j \in \mathcal{E}_0(i)} (q_j - \hat{q}_i(\mathbf{M}_j))^2 \quad (2.44)$$

où $\mathcal{E}_0(i) = \{j \in \llbracket 1, N \rrbracket \mid \mathbf{M}_j \in \mathcal{V}_0(i) \text{ et } i \neq j\}$ est l'ensemble des indices des points dans le voisinage du point \mathbf{M}_i . On note $\mathcal{N}_i = \text{Card}(\mathcal{E}_0(i))$ le nombre de points dans ce voisinage.

Il est également possible de reformuler le problème de minimisation à partir d'un système d'équations linéaires (sur)déterminé de la forme :

$$\mathbf{A}_i \mathbf{Z}_i = \mathbf{B}_i \quad (2.45)$$

où \mathbf{A}_i est une matrice rectangulaire de taille $(\mathcal{N}_i \times d)$ avec $\mathcal{N}_i \geq d$, et $d = 3$ est la dimension de l'espace physique. Dans le système (2.45), les différents termes ont pour expression :

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} x_{j_1} - x_i & y_{j_1} - y_i & z_{j_1} - z_i \\ x_{j_2} - x_i & y_{j_2} - y_i & z_{j_2} - z_i \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{j_{N_i}} - x_i & y_{j_{N_i}} - y_i & z_{j_{N_i}} - z_i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z}_i = \nabla q_i, \quad \mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} q_{j_1} - q_i \\ q_{j_2} - q_i \\ \vdots \\ q_{j_{N_i}} - q_i \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

La minimisation de S_i est équivalente à la résolution du système surdéterminé (2.45) au sens des moindres carrés et se ramène au système d'équations normales :

$$({}^t \mathbf{A}_i \mathbf{A}_i) \mathbf{Z}_i = {}^t \mathbf{A}_i \mathbf{B}_i \quad (2.47)$$

En pratique, le calcul de l'inverse de la matrice du système d'équations normales, c'est-à-dire $({}^t \mathbf{A}_i \mathbf{A}_i)^{-1}$, peut s'avérer instable numériquement si la matrice \mathbf{A}_i est mal conditionnée [36]. Pour cette raison, on utilise une méthode plus robuste numériquement qui consiste à effectuer une factorisation QR de la matrice \mathbf{A}_i avec une méthode de Gram-Schmidt modifiée [36] :

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{Q}_i \mathbf{R}_i \quad (2.48)$$

où $\mathbf{Q}_i \in \mathbb{R}^{N_i \times d}$ est une matrice orthogonale et $\mathbf{R}_i \in \mathbb{R}^{d \times d}$ est une matrice triangulaire supérieure.

La solution de (2.47) est alors obtenue par :

$$\mathbf{Z}_i = \mathbf{R}_i^{-1} {}^t \mathbf{Q}_i \mathbf{B}_i \quad (2.49)$$

Dans le cas où l'ensemble des points géométriques est fixe, la matrice \mathbf{A}_i est une matrice à coefficients constants. Donc la factorisation QR et le calcul de $\mathbf{W}_i = (\mathbf{R}_i^{-1} {}^t \mathbf{Q}_i)$ dans (2.49) peuvent être effectués une seule fois (à l'initialisation d'un calcul par exemple) puis le résultat stocké de sorte que la mise à jour de la valeur du gradient discret, lorsque la solution discrète varie, ne nécessite de calculer que le produit matrice-vecteur $\mathbf{W}_i \mathbf{B}_i$ en chaque point i .

2.2.2.2 Principe de la méthode des moindres carrés pour l'interpolation en un point

Dans le paragraphe §2.2.2.4, nous verrons que la méthode utilisée pour évaluer les gradients discrets sur les faces des cellules nécessite de connaître les valeurs des inconnues aux sommets des cellules. Ces valeurs sont obtenues en effectuant des interpolations basées sur une méthode des moindres carrés. Dans la suite de ce paragraphe, on présente cette méthode d'interpolation dans le cas général.

On reprend les notations introduites au paragraphe précédent §2.2.2.1. On considère une solution discrète $\{q_j\}_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket}$ connue sur un ensemble de N points \mathbf{M}_j , $j \in \llbracket 1, N \rrbracket$, de coordonnées $\mathbf{X}_j = {}^t(x_j, y_j, z_j)$. On cherche à évaluer la valeur discrète q_i de la solution discrète q au point \mathbf{M}_i de coordonnées $\mathbf{X}_i = {}^t(x_i, y_i, z_i)$, avec $i \notin \llbracket 1, N \rrbracket$. Pour cela, le modèle (2.43) est ajusté par la méthode des moindres carrés en cherchant les valeurs optimales de q_i et de ∇q_i qui minimisent la somme S_i définie par (2.44). On peut noter qu'il y a deux paramètres d'ajustement du modèle (q_i et ∇q_i) pour l'interpolation alors qu'il n'y en a qu'un seul (∇q_i) dans le cas du calcul du gradient discret (cf. §2.2.2.1).

Comme au paragraphe précédent, il est possible de reformuler le problème de minimisation à partir d'un système d'équations linéaires (sur)déterminé de la forme :

$$\mathbf{A}_i \mathbf{Z}_i = \mathbf{B}_i \quad (2.50)$$

où \mathbf{A}_i est une matrice rectangulaire de taille $(\mathcal{N}_i \times (d+1))$ avec $\mathcal{N}_i \geq (d+1)$. Dans le système (2.50), les différents termes ont pour expression :

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} x_{j_1} - x_i & y_{j_1} - y_i & z_{j_1} - z_i & 1 \\ x_{j_2} - x_i & y_{j_2} - y_i & z_{j_2} - z_i & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{j_{\mathcal{N}_i}} - x_i & y_{j_{\mathcal{N}_i}} - y_i & z_{j_{\mathcal{N}_i}} - z_i & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z}_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial q_i}{\partial x} \\ \frac{\partial q_i}{\partial y} \\ \frac{\partial q_i}{\partial z} \\ q_i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} q_{j_1} \\ q_{j_2} \\ \vdots \\ q_{j_{\mathcal{N}_i}} \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

La solution du système (2.50) est calculée en résolvant le système d'équations normales associé et en utilisant une factorisation QR . On a alors : $\mathbf{Z}_i = \mathbf{R}_i^{-1} {}^t \mathbf{Q}_i \mathbf{B}_i$. En posant :

$$\mathbf{P}_i = (x_i, y_i, z_i, 1) \quad (2.52)$$

$$\mathbf{W}_i = \mathbf{P}_i \mathbf{R}_i^{-1} {}^t \mathbf{Q}_i \quad (2.53)$$

on en déduit finalement :

$$q_i = \mathbf{W}_i \mathbf{B}_i \quad (2.54)$$

Dans le cas où l'ensemble des points géométriques est fixe, le vecteur \mathbf{W}_i est un vecteur ligne à coefficients constants qui peut être calculé une seule fois (à l'initialisation d'un calcul par exemple) puis stocké de sorte que la mise à jour de la valeur q_i ne nécessite que de calculer le produit $\mathbf{W}_i \mathbf{B}_i$.

2.2.2.3 Calcul des gradients discrets dans les cellules

La méthode des moindres carrés décrite au paragraphe §2.2.2.1 précédent est utilisée pour calculer le gradient discret de la solution discrète aux centres de gravité des cellules du maillage. Dans le cas d'une cellule Ω_i , l'ensemble $\mathcal{E}_0(i)$ des points du voisinage utilisés pour évaluer le gradient discret est constitué de l'ensemble des centres de gravité des cellules voisines internes et limites ayant au moins une face en commun, on a donc $\mathcal{E}_0(i) = \mathcal{V}_f(i)$ comme illustré sur la Figure 2.4.

L'utilisation des cellules voisines limites permet de s'assurer que le nombre de points dans le voisinage soit suffisamment important pour que le problème (2.45) ne soit pas sous-déterminé.

2.2.2.4 Calcul des gradients discrets sur les faces

La méthode des moindres carrés décrite au §2.2.2.1 est également utilisée pour calculer le gradient discret de la solution discrète aux centres de gravité des faces du maillage. Dans le cas d'une face Γ_{ij} entre deux cellules Ω_i et Ω_j , l'ensemble des points du voisinage utilisés pour évaluer le gradient discret au centre de gravité de la face est constitué des centres de gravité des cellules voisines Ω_i et Ω_j et des sommets de cette face (Figure 2.5). La solution discrète n'étant pas connue aux sommets de chaque cellule, il est nécessaire d'effectuer au préalable une interpolation des valeurs de la solution discrète connues aux centres de gravité des cellules vers les sommets. Cette interpolation est faite par la méthode d'interpolation décrite au paragraphe §2.2.2.2 et en considérant que le voisinage d'un sommet est constitué de l'ensemble des cellules rattachées à ce sommet (Figure 2.6).

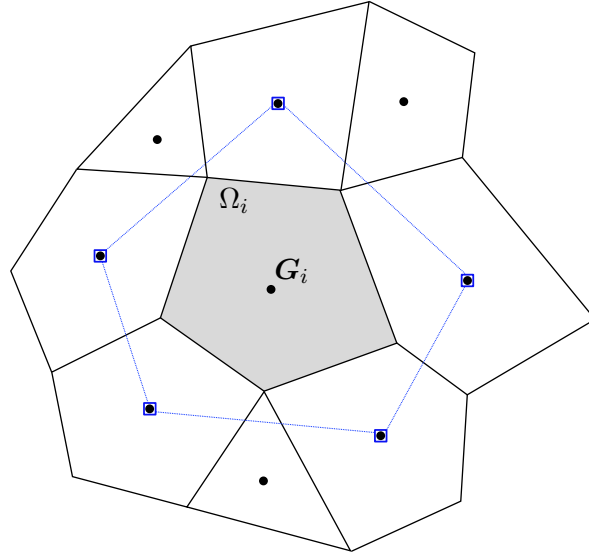


FIGURE 2.4 – Identification des points utilisés pour le calcul du gradient discret au centre G_i d'une cellule Ω_i par la méthode des moindres carrés.

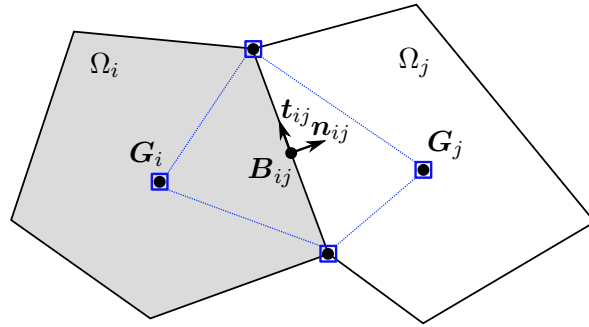


FIGURE 2.5 – Identification des points utilisés pour le calcul du gradient discret au centre B_{ij} d'une face Γ_{ij} par la méthode des moindres carrés.

2.2.3 Expression générale du schéma de discrétisation

En intégrant les lois de conservation du système (2.36) sur chaque cellule Ω_i du maillage entre les instants t^n et t^{n+1} , on obtient la formulation intégrale suivante :

$$\int_{\Omega_i} \mathbf{w}(t^{n+1}) \, d\Omega - \int_{\Omega_i} \mathbf{w}(t^n) \, d\Omega = - \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Gamma_{ij}} \mathcal{F} \cdot \mathbf{n}_{ij} \, d\Gamma \, dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_i} \mathbf{s} \, d\Omega \, dt \quad (2.55)$$

où le terme \mathbf{s} désigne l'ensemble des termes sources volumiques et $\mathcal{F} \cdot \mathbf{n}_{ij}$ désigne le flux total ($\mathcal{F} = \mathcal{H} - \mathcal{C} - \mathcal{V}$).

On note \mathbf{w}_i^n la valeur discrète de la moyenne de \mathbf{w} dans la cellule Ω_i à l'instant t^n :

$$\mathbf{w}_i^n \stackrel{\text{def}}{\simeq} \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \mathbf{w}(t^n) \, d\Omega \quad (2.56)$$

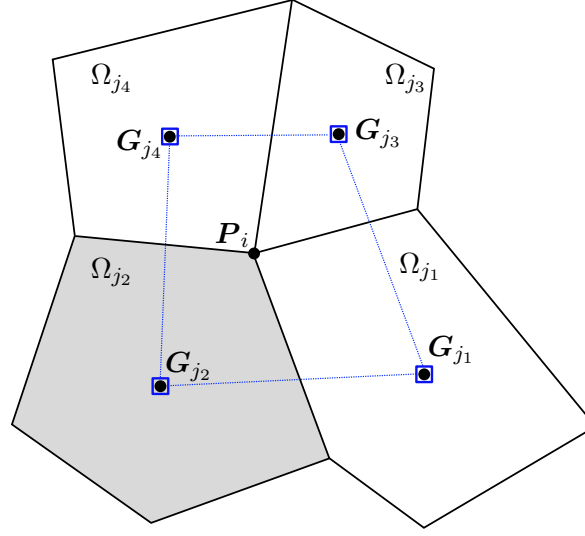


FIGURE 2.6 – Identification des points utilisés pour l'interpolation des valeurs discrètes connues aux centres des cellules vers un sommet P_i par la méthode des moindres carrés.

On introduit également la notion de flux numérique \mathbf{F}_{ij} traversant la face Γ_{ij} de la cellule Ω_i vers Ω_j :

$$\mathbf{F}_{ij} \cdot |\Gamma_{ij}| \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Delta t^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Gamma_{ij}} \mathcal{F} \cdot \mathbf{n}_{ij} d\Gamma dt \quad (2.57)$$

où $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$ est le pas de temps entre deux instants t^n et t^{n+1} . Le flux numérique \mathbf{F}_{ij} est une approximation discrète du flux continu \mathcal{F} . L'expression du flux numérique doit vérifier la propriété de conservativité :

$$\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji} \quad (2.58)$$

Pour le terme source, on pose :

$$\mathbf{s}_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Delta t^n} \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_i} \mathbf{s} d\Omega dt \quad (2.59)$$

On peut alors réécrire le système d'équations (2.55) sous la forme discrète :

$$\mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{\Delta t^n}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \mathbf{F}_{ij} |\Gamma_{ij}| + \Delta t^n \mathbf{s}_i \quad (2.60)$$

Pour simplifier l'écriture du schéma numérique dans les paragraphes suivants ainsi que sa résolution numérique (qui est effectuée en deux étapes, cf. §2.2.9), on introduit une notation complémentaire permettant d'isoler, d'un côté, les équations de conservation de la masse de chaque fluide et de l'autre, l'équation de conservation de quantité de mouvement du mélange. On pose :

$$\boldsymbol{\varrho}_i^n = {}^t(\tilde{\rho}_g|_i^n, \tilde{\rho}_l|_i^n) \quad (2.61)$$

ce qui permet d'écrire le vecteur des variables conservatives discrètes $\mathbf{w}_i^n = {}^t(\tilde{\rho}_g|_i^n, \tilde{\rho}_l|_i^n, \rho|_i^n \mathbf{v}_i^n)$ sous la forme :

$$\mathbf{w}_i^n = {}^t(\boldsymbol{\varrho}_i^n, \rho|_i^n \mathbf{v}_i^n) \quad (2.62)$$

De plus, on note $\mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{Q}}$ les deux composantes du flux numérique \mathbf{F}_{ij} intervenant dans les équations de conservation de la masse des deux fluides et on note $\mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{V}}$ celle de l'équation de conservation de quantité de mouvement du mélange fluide. On a alors :

$$\mathbf{F}_{ij} = {}^t(\mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{Q}}, \mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{V}}) \quad (2.63)$$

avec :

$$\mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{Q}} = \mathbf{H}_{ij}^{\mathcal{Q}} \quad (2.64)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{V}} = \mathbf{H}_{ij}^{\mathcal{V}} - \mathbf{C}_{ij}^{\mathcal{V}} - \mathbf{V}_{ij}^{\mathcal{V}} \quad (2.65)$$

Le système (2.60) s'écrit alors :

$$\begin{cases} \varrho_i^{n+1} = \varrho_i^n - \frac{\Delta t^n}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{Q}} |\Gamma_{ij}| \\ \rho_i^{n+1} \mathbf{v}_i^{n+1} = \rho_i^n \mathbf{v}_i^n - \frac{\Delta t^n}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{V}} |\Gamma_{ij}| + \Delta t^n \mathbf{s}_i^{\mathcal{V}} \end{cases} \quad (2.66)$$

$$\quad (2.67)$$

Pour obtenir la formulation discrète complète du modèle continu, il reste à exprimer les flux numériques $\mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{Q}}$ et $\mathbf{F}_{ij}^{\mathcal{V}}$, ainsi que le terme source volumique $\mathbf{s}_i^{\mathcal{V}}$ en fonction des inconnues discrètes \mathbf{w}_i^n et \mathbf{w}_i^{n+1} dans le système (2.67). Ceci fait l'objet des paragraphes suivants.

2.2.4 Discrétisation des flux liés à la partie hyperbolique des équations

Dans ce paragraphe, on se restreint à la discrétisation de la partie hyperbolique du système d'équations (2.36), c'est-à-dire du système continu suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}) + \nabla \cdot \mathcal{H} = 0 \quad (2.68)$$

où \mathcal{H} est défini par (2.37).

2.2.4.1 Remarques sur le caractère Bas-Mach des écoulements étudiés

Dans les injecteurs industriels, la vitesse d'injection du carburant liquide est de l'ordre de quelques mètres par seconde et la vitesse d'injection du gaz varie entre la dizaine et la centaine de mètres par seconde. De ce fait, le nombre de Mach ($\text{Ma} = |\mathbf{v}|/c$) dans l'écoulement peut s'étendre sur une large gamme d'échelles et atteindre des valeurs relativement faibles (par exemple, $\text{Ma} \simeq 10^{-3}$ dans le liquide). Dans le cas d'écoulements à faible nombre de Mach, les schémas numériques classiques utilisés pour résoudre les équations de la dynamique d'un fluide compressible deviennent de moins en moins bien conditionnés et de plus en plus dissipatifs [25].

Une solution pour remédier au mauvais comportement asymptotique des schémas numériques classiques est de diminuer artificiellement la valeur réelle de la célérité du son dans le fluide afin d'augmenter le nombre de Mach de l'écoulement et de diminuer la dissipation du schéma. Cette approche est toutefois limitée par le fait que l'augmentation artificielle de la compressibilité du fluide peut accroître les fluctuations de pression dans l'écoulement qui peuvent ensuite entrer en interaction avec d'autres phénomènes physiques. Pour cette raison, cette approche n'a pas été retenue.

Le schéma numérique utilisé dans cette thèse, issu de [40], a été développé pour les écoulements à deux fluides compressibles. Sa précision et sa robustesse sont indépendantes du nombre de Mach de l'écoulement. Ce schéma est décrit dans le paragraphe suivant.

2.2.4.2 Schéma bas-Mach

Principales caractéristiques

La discrétisation du système (2.68) est effectuée en utilisant un schéma bas-Mach [40]. Les caractéristiques principales du schéma bas-Mach sont :

- (C1) : Une formulation centrée pour l'évaluation du terme de pression dans l'équation de quantité de mouvement.
- (C2) : Une discrétisation décentrée-amont par rapport à la vitesse convective pour les termes de transport.
- (C3) : Un terme de stabilisation proportionnel à la différence de pression entre deux cellules voisines.
- (C4) : Une discrétisation temporelle partiellement implicite pour s'affranchir de la restriction sur le pas de temps liée à la propagation des ondes acoustiques.

Expression du flux numérique bas-Mach

Le système discret correspondant au système continu (2.68) s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\Delta t^n}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \mathbf{H}_{ij}^{\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{\rho}_i^{n+1}, \boldsymbol{\rho}_j^{n+1}, \mathbf{v}_i^n, \mathbf{v}_j^n) |\Gamma_{ij}| \\ \rho_i^{n+1} \mathbf{v}_i^{n+1} = \rho_i^n \mathbf{v}_i^n - \frac{\Delta t^n}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \mathbf{H}_{ij}^{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\rho}_i^{n+1}, \boldsymbol{\rho}_j^{n+1}, \mathbf{v}_i^n, \mathbf{v}_j^n) |\Gamma_{ij}| \end{array} \right. \quad (2.69)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_i^{n+1} \mathbf{v}_i^{n+1} = \rho_i^n \mathbf{v}_i^n - \frac{\Delta t^n}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \mathbf{H}_{ij}^{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\rho}_i^{n+1}, \boldsymbol{\rho}_j^{n+1}, \mathbf{v}_i^n, \mathbf{v}_j^n) |\Gamma_{ij}| \end{array} \right. \quad (2.70)$$

Il convient de noter que dans le système (2.70), le flux numérique bas-Mach \mathbf{H}_{ij} dépend de $\boldsymbol{\rho}$ à l'instant t^{n+1} et de \mathbf{v} à l'instant t^n . Ainsi, on obtient une discrétisation implicite de l'équation (2.69) vis-à-vis de la variable $\boldsymbol{\rho}$, ce qui permet d'avoir la caractéristique (C4).

Pour donner l'expression de $\mathbf{H}_{ij}^{\boldsymbol{\rho}}$ et $\mathbf{H}_{ij}^{\mathbf{v}}$, on pose :

$$p_{ij} = \frac{1}{2} (p_i^{n+1} + p_j^{n+1}) \quad (2.71)$$

$$\Delta p_{ij} = p_j^{n+1} - p_i^{n+1} \quad (2.72)$$

$$v_{ij} = \frac{1}{2} (\mathbf{v}_i^n + \mathbf{v}_j^n) \cdot \mathbf{n}_{ij} \quad (2.73)$$

où $p_i^{n+1} = p(\boldsymbol{\rho}_i^{n+1})$ et $p_j^{n+1} = p(\boldsymbol{\rho}_j^{n+1})$ désignent respectivement les pressions dans les cellules Ω_i et Ω_j à l'instant t^{n+1} .

On définit également les vitesses convectives sur la face Γ_{ij} :

$$v_{ij}^+ = \max[0, v_{ij}] - \gamma_{ij} \min[0, \Delta p_{ij}] \quad (2.74)$$

$$v_{ij}^- = \min[0, v_{ij}] - \underbrace{\gamma_{ij} \max[0, \Delta p_{ij}]}_{\text{terme de stabilisation}} \quad (2.75)$$

Les flux numériques s'écrivent alors :

$$\mathbf{H}_{ij}^{\boldsymbol{\rho}} = v_{ij}^+ \boldsymbol{\rho}_i^{n+1} + v_{ij}^- \boldsymbol{\rho}_j^{n+1} \quad (2.76)$$

$$\mathbf{H}_{ij}^{\mathbf{v}} = v_{ij}^+ [\rho_i^{n+1} \mathbf{v}_i^n] + v_{ij}^- [\rho_j^{n+1} \mathbf{v}_j^n] + p_{ij} \mathbf{n}_{ij} \quad (2.77)$$

Dans (2.75) et (2.74), le coefficient positif γ_{ij} du terme de stabilisation est calculé à partir de (2.78) :

$$\gamma_{ij} = \Delta t \times \max \left(\frac{|\partial \Omega_i|}{2\rho_i^{n+1} |\Omega_i|}, \frac{|\partial \Omega_j|}{2\rho_j^{n+1} |\Omega_j|} \right) \quad (2.78)$$

Ce terme assure la stabilité du schéma numérique sous la condition de stabilité de type CFL suivante (voir [40]) :

$$\max_{i \in \llbracket 1, N_c \rrbracket} \left(2\bar{v}_i \frac{|\partial\Omega_i|}{|\Omega_i|} \right) \Delta t \leq 1 \quad (2.79)$$

avec $\bar{v}_i = \frac{1}{\rho_i^{n+1} |\partial\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} |v_{ij}^-| \rho_j^{n+1} |\Gamma_{ij}|$.

Prise en compte des forces volumiques constantes

Si l'écoulement est soumis à une force volumique constante, par exemple la gravité \mathbf{g} , le terme de stabilisation dépendant de Δp_{ij} doit être modifié pour éviter la création de courants parasites causés par le gradient de pression hydrostatique. Dans ce cas, l'expression du terme Δp_{ij} , initialement définie par (2.72), devient (voir [40]) :

$$\Delta p_{ij} = p_j^{n+1} - p_i^{n+1} - \left(\rho_i^{n+1} \mathbf{G}_i \mathbf{I}_{ij} + \rho_j^{n+1} \mathbf{G}_j \mathbf{I}_{ij} \right) \cdot \mathbf{g} \quad (2.80)$$

2.2.5 Discrétisation du tenseur capillaire

La discrétisation du tenseur capillaire (2.33) est effectuée selon un schéma centré en espace. Le flux numérique capillaire discret $\mathbf{C}_{ij}^{\mathbf{v}}$ à travers la face Γ_{ij} a pour expression :

$$\mathbf{C}_{ij}^{\mathbf{v}} = \sigma \left\| \nabla \alpha_{ij}^{n+1} \right\| \left(\mathbf{n}_{ij} + \frac{\nabla \alpha_{ij}^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{ij}}{\left\| \nabla \alpha_{ij}^{n+1} \right\|^2} \nabla \alpha_{ij}^{n+1} \right) \quad (2.81)$$

Le calcul du gradient de fraction volumique $\nabla \alpha_{ij}$ sur la face Γ_{ij} est effectué en appliquant la procédure décrite au paragraphe §2.2.2.4.

2.2.6 Discrétisation du tenseur visqueux

La discrétisation du tenseur des contraintes visqueuses (2.25) est réalisée avec un schéma centré en espace. Le flux numérique correspondant a alors pour expression :

$$\mathbf{V}_{ij}^{\mathbf{v}} = \mu_{ij}^{n+1} \left(\nabla \mathbf{v}_{ij}^n + {}^t \nabla \mathbf{v}_{ij}^n \right) \cdot \mathbf{n}_{ij} \quad (2.82)$$

où μ_{ij} est la viscosité dynamique du mélange calculée sur la face Γ_{ij} à partir des valeurs dans les cellules adjacentes Ω_i et Ω_j :

$$\mu_{ij}^n = f_\mu(\mu_i^n, \mu_j^n) \quad (2.83)$$

avec, d'après (2.26), $\mu_i^n = (\mu_l \alpha_l|_i^n + \mu_g \alpha_g|_i^n)$ et $\mu_j^n = (\mu_l \alpha_l|_j^n + \mu_g \alpha_g|_j^n)$.

La fonction f_μ doit satisfaire la propriété de consistance (P1), définie au §2.1.2.4, c'est à dire : $f_\mu(\mu, \mu) = \mu$. Deux choix naturels sont alors envisageables pour définir f_μ :

— La moyenne arithmétique :

$$f_\mu(\mu_i^n, \mu_j^n) = \frac{1}{2}(\mu_i^n + \mu_j^n) \quad (2.84)$$

— La moyenne harmonique :

$$f_\mu(\mu_i^n, \mu_j^n) = \frac{2\mu_i^n \mu_j^n}{\mu_i^n + \mu_j^n} \quad (2.85)$$

Dans [15], l’auteur a montré que sur des maillages cartésiens et uniformes l’utilisation de la moyenne harmonique (2.85) pour le calcul de la viscosité dynamique sur les faces, associée à une discrétisation centrée du gradient de vitesse, permet de préserver exactement les champs de vitesses linéaires par morceaux, c’est-à-dire les écoulements de type Couette plan. Pour cette raison, nous avons choisi d’utiliser cette définition de la viscosité dynamique sur les faces.

En ce qui concerne le calcul du gradient de vitesse $\nabla \mathbf{v}|_{ij}$ sur la face Γ_{ij} , il est effectué en appliquant la procédure décrite au paragraphe §2.2.2.4.

2.2.7 Discrétisation du terme de gravité

Le terme source de gravité sur une cellule Ω_i a pour expression :

$$\mathbf{s}_g|_i = \rho_i^{n+1} \mathbf{g} \quad (2.86)$$

2.2.8 Extension du schéma Bas-Mach à l’ordre 2 en espace

Dans le paragraphe §2.2.4, la discrétisation spatiale de la partie hyperbolique des équations a été faite en utilisant un schéma Bas-Mach à l’ordre 1. En l’état, ce schéma est trop dissipatif pour donner des résultats précis avec des maillages de taille raisonnable. Pour remédier à cela, il est nécessaire d’augmenter l’ordre de convergence du schéma numérique. Cette montée en ordre est faite grâce à une méthode de type *MUSCL* (Modified Upwind Scheme for Conservation Laws) introduite dans [97]. Après avoir présenté le principe de la méthode MUSCL dans le cas général, nous décrivons comment nous avons adapté cette méthode au cas particulier du système hyperbolique de lois de conservation (2.68).

2.2.8.1 Principe de la méthode MUSCL dans le cas général

Le principe de la méthode MUSCL repose sur deux étapes :

1. **Reconstruction dans chaque cellule** d’une approximation polynomiale par morceaux de la solution discrète à partir des valeurs moyennes connues dans les cellules.
2. **Évaluation des flux** sur chaque face à partir des valeurs reconstruites aux points de quadrature en utilisant la reconstruction polynomiale calculée précédemment dans chaque cellule.

Dans le cas où on souhaite obtenir une précision d’ordre 2, une reconstruction avec des polynômes d’ordre 1 est suffisante. Connaissant la valeur moyenne q_i de la solution discrète dans une cellule Ω_i , on définit alors une reconstruction affine \hat{q}_i :

$$\forall \mathbf{M} \in \Omega_i, \hat{q}_i(\mathbf{M}) = q_i + \varphi_i \nabla q_i \cdot \mathbf{G}_i \mathbf{M} \quad (2.87)$$

où ∇q_i est le gradient de la solution discrète, calculé par la méthode des moindres carrés introduite au paragraphe §2.2.2.3, et φ_i est un limiteur qui permet d’assurer la stabilité du schéma et d’assurer le fait que les variables reconstruites soient admissibles. Généralement, le limiteur est défini tel que $\varphi_i \in [0, 1]$.

Le calcul du limiteur φ_i s’appuie la plupart du temps sur des critères semi-empiriques car il n’existe pas à ce jour de théorie mathématique pour les systèmes hyperboliques non-linéaires de lois de conservation. De ce fait, les limiteurs existants dans la littérature sont basés sur des considérations théoriques développées pour des équations scalaires uniquement, comme par exemple le *principe de variation totale décroissante* [45] ou encore le *principe de préservation du maximum* [22]. Toutefois dans le cas de système, une condition essentielle est

la préservation des états admissibles qui dans une certaine mesure généralise le principe du maximum. En pratique, l'admissibilité s'exprime le plus souvent comme une contrainte sur les variables dites naturelles (positivité de la densité, fraction volumique positive et inférieure à l'unité, ...), c'est pourquoi l'étape de reconstruction est le plus souvent effectuée sur ces variables au détriment des variables dites conservatives. L'expression finale du limiteur φ_i sera donnée au paragraphe 2.2.8.4.

Après l'étape de reconstruction, l'évaluation des flux est faite en utilisant les valeurs de la solution discrète calculées aux points de quadrature sur les faces. Ainsi, dans le cas d'une reconstruction linéaire par morceau, le flux numérique $\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}(q_i, q_j)$ à travers la face Γ_{ij} pour un schéma à l'ordre 1 devient $\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}(\hat{q}_{ij}, \hat{q}_{ji})$ où \hat{q}_{ij} et \hat{q}_{ji} sont les états reconstruits au centre de la face Γ_{ij} :

$$\begin{cases} \hat{q}_{ij} = q_i + \varphi_i \nabla q_i \cdot \mathbf{G}_i \mathbf{B}_{ij} \\ \hat{q}_{ji} = q_j + \varphi_j \nabla q_j \cdot \mathbf{G}_j \mathbf{B}_{ij} \end{cases} \quad (2.88)$$

2.2.8.2 Développement d'un limiteur compressif

Le système hyperbolique non-linéaire de lois de conservation (2.68) est issu d'un modèle bi-fluide où les deux phases sont non-miscibles. Au niveau discret, la contrainte de non-miscibilité peut se traduire par la volonté de vouloir préserver la raideur de l'interface entre les deux fluides, c'est-à-dire de réduire au maximum la diffusion artificielle des champs discrets de fraction volumique de chaque fluide.

Dans la littérature, plusieurs méthodes numériques dites *VOF-algébriques*¹ ont été développées pour résoudre l'équation de transport d'une interface diffuse sur des maillages non-structurés. Celles-ci permettent de limiter l'étalement artificiel de l'interface et d'éviter une distorsion excessive de l'interface grâce à des schémas compressifs. Parmi les méthodes existantes, on trouve l'approche CICSAM [94, 93], HRIC [65] et STACS [24]. Ces trois approches sont basées sur des schémas pour lesquels les valeurs intervenant dans l'expression des flux sont déterminées en utilisant le diagramme NVD (*Normalized Variable Diagram* [59]) combiné au critère CBC (*Convective Boundedness Criterion* [35]). Comme le diagramme NVD et le critère CBC sont des principes initialement développés dans le cas monodimensionnel, ils ont été adaptés pour des maillages non-structurés multidimensionnels en les appliquant selon la normale à chaque face. L'extension aux cas non-structurés peut toutefois conduire à l'apparition de valeurs non-admissibles. En pratique, celles-ci sont éliminées par seuillage (dans ce cas le schéma n'est plus conservatif) ou par une procédure de correction à posteriori des flux [94, 93] qui induit un coût de calcul supplémentaire. Pour éviter une distorsion importante de l'interface, une intégration temporelle d'ordre 2 est également utilisée et l'effet compressif du schéma est contrôlé localement en fonction de la direction de la normale à l'interface par rapport à celle de la normale à la face considérée pour le calcul du flux.

Dans le cadre de cette thèse, nous avons souhaité introduire le caractère *compressif* dans le schéma MUSCL décrit précédemment. Ceci a été réalisé en cherchant une expression du limiteur qui permet de maximiser le gradient discret utilisé lors de la reconstruction et qui assure également le principe du maximum local ou global au sens discret. Dans le paragraphe suivant, nous présentons les développements qui s'appuient sur l'étude du cas d'une équation hyperbolique scalaire.

1. Par opposition aux méthodes dites *VOF-géométrique* basées sur une reconstruction explicite de l'interface (du type SLIC ou PLIC)

Étude du cas d'une équation scalaire :

On considère une grandeur scalaire q solution de l'équation hyperbolique de transport suivante :

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot f(q) = 0 \quad (2.89)$$

où le flux a pour expression :

$$f(q) = \mathbf{a} q \quad (2.90)$$

avec le champ de vitesse \mathbf{a} supposé à divergence nulle :

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = 0 \quad (2.91)$$

En effectuant la discrétisation de l'équation (2.89) par un schéma temporel d'Euler explicite et un schéma spatial de type MUSCL, on obtient le schéma discret suivant :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n+1} = q_i^n - \frac{\Delta t}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} g(\hat{q}_{ij}^n, \hat{q}_{ji}^n) |\Gamma_{ij}| \quad (2.92)$$

Le flux numérique décentré g a pour expression :

$$g(\hat{q}_{ij}^n, \hat{q}_{ji}^n) = a_{ij}^+ \hat{q}_{i,j}^n + a_{ij}^- \hat{q}_{j,i}^n \quad (2.93)$$

avec :

$$a_{ij} = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_{ij} d\Gamma \quad (2.94)$$

$$a_{ij}^+ = \max(a_{ij}, 0) \quad (2.95)$$

$$a_{ij}^- = \min(a_{ij}, 0) \quad (2.96)$$

Les variables \hat{q}_{ij}^n et \hat{q}_{ji}^n , définies en (2.88), désignent respectivement les états reconstruits à gauche et à droite de la face Γ_{ij} en utilisant les gradients discrets limités.

Sous l'hypothèse d'un champ de vitesse à divergence nulle (2.91), le flux numérique g vérifie la propriété de conservativité :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} g_{ij}(q_i, q_j) |\Gamma_{ij}| = 0 \quad (2.97)$$

On souhaite étudier sous quelles conditions le schéma discret satisfait le principe du maximum local :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n,\min} \leq q_i^{n+1} \leq q_i^{n,\max} \quad (2.98)$$

où :

$$q_i^{n,\min} = \min_{j \in \mathcal{V}_i} (q_i^n, q_j^n) \quad (2.99)$$

$$q_i^{n,\max} = \max_{j \in \mathcal{V}_i} (q_i^n, q_j^n) \quad (2.100)$$

Pour cela, on introduit au préalable plusieurs notations. On définit les sous-voisinages suivants :

$$\mathcal{V}_i^+ = \{j \in \mathcal{V}_f(i) \mid a_{ij} \geq 0\} \quad (2.101)$$

$$\mathcal{V}_i^- = \{j \in \mathcal{V}_f(i) \mid a_{ij} < 0\} \quad (2.102)$$

qui vérifient : $\mathcal{V}_i = \mathcal{V}_i^+ \cup \mathcal{V}_i^-$. Par définition, \mathcal{V}_i^+ correspond à l'ensemble des faces Γ_{ij} de la cellule Ω_i pour lesquelles le champ de vitesse a est sortant (vis-à-vis de la cellule Ω_i) et \mathcal{V}_i^- correspond à l'ensemble pour lesquelles le champ de vitesse a est rentrant (vis-à-vis de la cellule Ω_i). On note également :

$$\lambda_i = \Delta t \frac{|\partial\Omega_i|}{|\Omega_i|} \quad (2.103)$$

Pour parvenir au résultat (2.98), on cherche tout d'abord un encadrement de q_i^{n+1} .

Lemma 2.2.1

Si le flux numérique défini par (2.93) vérifie (2.97) et si la condition CFL (2.104) est respectée :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad \lambda_i \leq \frac{1}{\max_{j \in \mathcal{V}_f(i)} (|a_{ij}|)} \quad (2.104)$$

alors le schéma discret défini par (2.92) vérifie :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad Q_i^{n,\min} \leq q_i^{n+1} \leq Q_i^{n,\max} \quad (2.105)$$

avec :

$$Q_i^{n,\min} = \min_{j \in \mathcal{V}_i^+, k \in \mathcal{V}_i^-} (q_i^n, 2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n, \hat{q}_{ki}^n) \quad (2.106)$$

$$Q_i^{n,\max} = \max_{j \in \mathcal{V}_i^+, k \in \mathcal{V}_i^-} (q_i^n, 2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n, \hat{q}_{ki}^n) \quad (2.107)$$

Remarque 2

Dans le cas d'une reconstruction linéaire par morceau (2.87), la quantité $(\hat{q}_{ij}^n)' = (2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n)$, qui intervient dans les expressions (2.106) et (2.107), peut s'interpréter comme la valeur reconstruite au point \mathbf{B}'_{ij} symétrique de \mathbf{B}_{ij} par rapport à \mathbf{G}_i .

Démonstration : Grâce à l'hypothèse (2.97), le schéma (2.92) peut s'écrire comme la combinaison convexe suivante :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n+1} = \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} q_{ij}^{n+1} \frac{|\Gamma_{ij}|}{|\partial\Omega_i|} \quad (2.108)$$

avec :

$$q_{ij}^{n+1} = q_i^n - \lambda_i [g_{ij}(\hat{q}_{ij}^n, \hat{q}_{ji}^n) - g_{ij}(q_i^n, q_i^n)] \quad (2.109)$$

On cherche un encadrement pour q_{ij}^{n+1} à partir duquel on pourra déduire un encadrement pour q_i^{n+1} .

On distingue deux cas selon le signe de a_{ij} :

▷ Si $a_{ij} \geq 0$:

$$\begin{aligned} q_{ij}^{n+1} &= q_i^n - \lambda_i a_{ij} (\hat{q}_{ij}^n - q_i^n) \\ &= (1 - \lambda_i a_{ij}) q_i^n + \lambda_i a_{ij} (2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n) \end{aligned}$$

En utilisant la condition CFL (2.104), on remarque que q_{ij}^{n+1} s'écrit comme une combinaison convexe des termes q_i^n et $(2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n)$. On a donc :

$$Q_i^{n,\min} \leq \min_{j \in \mathcal{V}_i^+} (q_i^n, 2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n) \leq q_{ij}^{n+1} \leq \max_{j \in \mathcal{V}_i^+} (q_i^n, 2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n) \leq Q_i^{n,\max} \quad (2.110)$$

▷ Si $a_{ij} < 0$:

$$\begin{aligned} q_{ij}^{n+1} &= q_i^n + \lambda_i |a_{ij}| (\hat{q}_{ji}^n - q_i^n) \\ &= (1 - \lambda_i |a_{ij}|) q_i^n + \lambda_i |a_{ij}| \hat{q}_{ji}^n \end{aligned}$$

Une nouvelle fois, en utilisant la condition CFL (2.104), on remarque que q_{ij}^{n+1} s'écrit comme une combinaison convexe des termes q_i^n et \hat{q}_{ji}^n . On a donc :

$$Q_i^{n,\min} \leq \min_{j \in \mathcal{V}_i^-} (q_i^n, \hat{q}_{ji}^n) \leq q_{ij}^{n+1} \leq \max_{j \in \mathcal{V}_i^-} (q_i^n, \hat{q}_{ji}^n) \leq Q_i^{n,\max} \quad (2.111)$$

Finalement, on a montré que :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \forall j \in \mathcal{V}_f(i), \quad Q_i^{n,\min} \leq q_{ij}^{n+1} \leq Q_i^{n,\max} \quad (2.112)$$

En utilisant (2.108), on en déduit le résultat :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad Q_i^{n,\min} \leq q_i^{n+1} \leq Q_i^{n,\max} \quad (2.113) \quad \blacksquare$$

À partir du Lemme 2.2.1 qui donne un encadrement de q_i^{n+1} , nous pouvons exprimer sous quelles conditions q_i^{n+1} vérifie le principe du maximum local :

Proposition 2.2.1 (Principe du maximum local)

Si le flux numérique défini par (2.93) vérifie (2.97) et si la condition CFL suivante est respectée :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad \lambda_i \leq \frac{1}{\max_{j \in \mathcal{V}_f(i)} (|a_{ij}|)} \quad (2.114)$$

avec λ_i définie en (2.103), et si :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \forall j \in \mathcal{V}_i^+, \quad \begin{cases} q_i^{n,\min} \leq 2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n \leq q_i^{n,\max} \\ q_j^{n,\min} \leq \hat{q}_{ij}^n \leq q_j^{n,\max} \end{cases} \quad (2.115)$$

$$(2.116)$$

alors le schéma vérifie le principe du maximum local :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n,\min} \leq q_i^{n+1} \leq q_i^{n,\max} \quad (2.117)$$

Démonstration : On commence par démontrer l'inégalité de gauche de l'encadrement (2.117).

D'après la définition (2.99), on a :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n,\min} \leq q_i^n \quad (2.118)$$

et d'après l'hypothèse (2.115), on a :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n,\min} \leq \min_{j \in \mathcal{V}_i^+} (2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n) \quad (2.119)$$

De plus, l'hypothèse (2.116) permet d'écrire :

$$(2.116) \iff \forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad \forall j \in \mathcal{V}_i^-, \quad q_i^{n,\min} \leq \hat{q}_{ji}^n \quad (2.120)$$

$$(2.116) \iff \forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n,\min} \leq \min_{j \in \mathcal{V}_i^-} (\hat{q}_{ji}^n) \quad (2.121)$$

En combinant les inégalités (2.118), (2.119) et (2.121), on obtient :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n,\min} \leq \min_{j \in \mathcal{V}_i^+, k \in \mathcal{V}_i^-} (q_i^n, 2q_i^n - \hat{q}_{ij}^n, \hat{q}_{ki}^n) \quad (2.122)$$

c'est-à-dire, d'après la définition (2.106) de $Q_i^{n,\min}$:

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n,\min} \leq Q_i^{n,\min} \quad (2.123)$$

En utilisant le fait que, sous la condition CFL (2.114), le lemme (2.2.1) implique :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad Q_i^{n,\min} \leq q_i^{n+1} \quad (2.124)$$

on en déduit alors l'inégalité de gauche de l'encadrement (2.117) :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n,\min} \leq Q_i^{n,\min} \leq q_i^{n+1} \quad (2.125)$$

La démonstration de l'inégalité de droite de l'encadrement (2.117) s'obtient en effectuant un raisonnement similaire qui consiste à montrer que :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad Q_i^{n,\max} \leq q_i^{n,\max} \quad (2.126)$$

Puis en utilisant le résultat du lemme (2.2.1), on en déduit la seconde inégalité à démontrer :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q_i^{n+1} \leq Q_i^{n,\max} \leq q_i^{n,\max} \quad (2.127) \quad \blacksquare$$

Remarque 3

En reprenant la démonstration de la Proposition 2.2.1, on voit immédiatement que le résultat (2.117) reste valable dans le cas où on considère un voisinage plus étendu lors de la définition de $q_i^{n,\min}$ et $q_i^{n,\max}$. En particulier, si on l'étend à tout le maillage, le schéma numérique vérifie alors le principe du maximum global :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad q^{n,\min} \leq q_i^{n+1} \leq q^{n,\max} \quad (2.128)$$

où $q^{n,\min}$ et $q^{n,\max}$ sont respectivement le minimum global et le maximum global de la solution discrète à l'instant t^n sur l'ensemble du maillage :

$$q^{n,\min} = \min_{j \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket} (q_j^n) \quad (2.129)$$

$$q^{n,\max} = \max_{j \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket} (q_j^n) \quad (2.130)$$

Développement d'un limiteur compressif

La Proposition 2.2.1 définit les contraintes sur les valeurs reconstruites de la solution discrète pour que le schéma associé satisfasse le principe du maximum local discret. Dans le cas d'une reconstruction linéaire par morceaux, on peut alors définir l'ensemble des valeurs admissibles du limiteur φ_i dans la cellule Ω_i permettant de vérifier (2.115) et (2.116). En imposant que la valeur de φ_i soit positive, celle-ci doit également satisfaire le système suivant :

$$\forall j \in \mathcal{V}_i^+, \quad \begin{cases} q_i^{n,\min} \leq q_i^n - \varphi_i \nabla q_i \cdot \mathbf{G}_i \mathbf{B}_{ij} \leq q_i^{n,\max} \\ q_j^{n,\min} \leq q_i^n + \varphi_i \nabla q_i \cdot \mathbf{G}_i \mathbf{B}_{ij} \leq q_j^{n,\max} \end{cases} \quad (2.131)$$

En notant $\Delta q_{ij} = \nabla q_i \cdot \mathbf{G}_i \mathbf{B}_{ij}$, on obtient :

$$\forall j \in \mathcal{V}_i^+, \quad \begin{cases} q_i^{n,\min} - q_i^n \leq -\varphi_i \Delta q_{ij} \leq q_i^{n,\max} - q_i^n \\ q_j^{n,\min} - q_i^n \leq +\varphi_i \Delta q_{ij} \leq q_j^{n,\max} - q_i^n \end{cases} \quad (2.133)$$

On distingue alors trois cas suivant la valeur de Δq_{ij} :

▷ Si $\Delta q_{ij} > 0$: Le système (2.133)-(2.134) s'écrit :

$$\forall j \in \mathcal{V}_i^+, \quad \begin{cases} \frac{q_i^n - q_i^{n,\max}}{\Delta q_{ij}} \leq \varphi_i \leq \frac{q_i^n - q_i^{n,\min}}{\Delta q_{ij}} \\ \frac{q_j^{n,\min} - q_i^n}{\Delta q_{ij}} \leq \varphi_i \leq \frac{q_j^{n,\max} - q_i^n}{\Delta q_{ij}} \end{cases} \quad (2.135)$$

Par définition, on a $q_i^n \leq q_i^{n,\max}$ et $q_j^{n,\min} \leq q_i^n$ si $j \in \mathcal{V}_i$. Donc pour $\varphi_i \geq 0$, les inégalités de gauche dans le système précédent sont toujours vraies. Le système implique alors :

$$0 \leq \varphi_i \leq \min_{j \in \mathcal{V}_i^+} \left(\frac{q_i^n - q_i^{n,\max}}{\Delta q_{ij}}, \frac{q_j^{n,\max} - q_i^n}{\Delta q_{ij}} \right) \quad (2.137)$$

▷ Si $\Delta q_{ij} < 0$: Le système (2.133)-(2.134) s'écrit :

$$\forall j \in \mathcal{V}_i^+, \quad \begin{cases} \frac{q_i^{n,\min} - q_i^n}{|\Delta q_{ij}|} \leq \varphi_i \leq \frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{|\Delta q_{ij}|} \\ \frac{q_i^n - q_j^{n,\max}}{|\Delta q_{ij}|} \leq \varphi_i \leq \frac{q_i^n - q_j^{n,\min}}{|\Delta q_{ij}|} \end{cases} \quad (2.138)$$

Par définition, on a $q_i^{n,\min} \leq q_i^n$ et $q_i^n \leq q_j^{n,\max}$ si $j \in \mathcal{V}_i$. Donc pour $\varphi_i \geq 0$, les inégalités de gauche dans le système précédent sont toujours vraies. Le système implique alors :

$$0 \leq \varphi_i \leq \min_{j \in \mathcal{V}_i^+} \left(\frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{|\Delta q_{ij}|}, \frac{q_i^n - q_j^{n,\min}}{|\Delta q_{ij}|} \right) \quad (2.140)$$

▷ Si $\Delta q_{ij} = 0$: Dans ce cas, le système (2.133)-(2.134) n'implique aucune contrainte sur la valeur maximale du limiteur φ_i .

Finalement, en combinant les trois cas précédents, on obtient que le limiteur φ_i doit être compris dans l'intervalle :

$$0 \leq \varphi_i \leq \varphi_i^{\max} \quad (2.141)$$

avec :

$$\varphi_i^{\max} = \min_{j \in \mathcal{V}_i^+} \begin{cases} \min \left(\frac{q_i^n - q_i^{n,\min}}{\Delta q_{ij}}, \frac{q_j^{n,\max} - q_i^n}{\Delta q_{ij}} \right) & \text{si } \Delta q_{ij} > 0 \\ \min \left(\frac{q_i^n - q_j^{n,\min}}{|\Delta q_{ij}|}, \frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{|\Delta q_{ij}|} \right) & \text{si } \Delta q_{ij} < 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.142)$$

La valeur φ_i^{\max} , définie par (2.142), est la valeur maximale que peut prendre le limiteur φ_i dans la cellule Ω_i tout en garantissant le principe du maximum local. Dans la pratique, le calcul de φ_i^{\max} dans la cellule Ω_i nécessite de connaître les extremums locaux des cellules voisines, c'est-à-dire $q_j^{n,\min}$ et $q_j^{n,\max}$ avec $j \in \mathcal{V}_f(i)$. Comme ces valeurs sont aussi nécessaires pour d'autres cellules voisines de Ω_j , il est préférable de les sauvegarder pour éviter de les recalculer plusieurs fois à chaque itération temporelle. Cette pratique induit alors un surcoût mémoire non-négligeable et des surcoûts de communication dans le cas où on travaille dans un environnement parallèle à mémoire distribuée. Pour pallier ce problème, on propose une variante du limiteur (2.142) qui est plus simple à mettre en œuvre mais qui ne satisfait plus la Proposition 2.2.1. Ce limiteur s'obtient en remplaçant $q_j^{n,\min}$ par $q_i^{n,\min}$, $q_j^{n,\max}$ par $q_i^{n,\max}$ et $\mathcal{V}_f(i)^+$ par $\mathcal{V}_f(i)$ dans l'expression (2.142). On obtient alors :

$$\varphi_i^{\text{comp.}} = \min_{j \in \mathcal{V}_i} \begin{cases} \min \left(\frac{q_i^n - q_i^{n,\min}}{|\Delta q_{ij}|}, \frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{|\Delta q_{ij}|} \right) & \text{si } \Delta q_{ij} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.143)$$

En posant :

$$|\Delta q_i|^{\max} = \max_{j \in \mathcal{V}_f(i)} |q_{ij}^n - q_i^n| \quad (2.144)$$

On peut alors écrire le limiteur (2.143) sous la forme suivante :

$$\varphi_i^{\text{comp.}} = \begin{cases} \min \left(\frac{q_i^n - q_i^{n,\min}}{|\Delta q_i|^{\max}}, \frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{|\Delta q_i|^{\max}} \right) & \text{si } |\Delta q_i|^{\max} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.145)$$

Ce limiteur assure la condition suivante :

$$\forall \varphi_i \in [0, \varphi_i^{\text{comp.}}], \forall j \in \mathcal{V}_i, \quad q_i^{n,\min} \leq q_i^n \pm \varphi_i \nabla q_i \cdot \mathbf{G}_i \mathbf{B}_{ij} \leq q_i^{n,\max} \quad (2.146)$$

Cette condition permet d'avoir un schéma numérique qui satisfait le principe du maximum global (cf. Remarque 3).

De part sa définition (2.145), la valeur maximale du limiteur $\varphi_i^{\text{comp.}}$ peut être plus grande que l'unité. Avec ce limiteur il est donc possible d'obtenir une reconstruction qui maximise le gradient de la solution reconstruite dans chaque cellule. Cette caractéristique est très intéressante dans le cas où on souhaite résoudre le transport d'une discontinuité de type fonction de Heaviside car celle-ci permet de raidir et de préserver le front en contrebalançant les effets diffusifs d'un schéma numérique classique. Les limiteurs possédant cette propriété sont généralement dits *compressifs* [50].

Dans le cas où on souhaite obtenir un limiteur qui préserve la linéarité de la solution discrète (en supprimant le caractère compressif), il suffit d'imposer la contrainte supplémentaire $\varphi_i^{\max} \leq 1$ dans la définition du limiteur (2.145) de sorte que la reconstruction linéaire dans chaque cellule soit exacte lorsque la solution continue est linéaire.

2.2.8.3 Application au transport d'une discontinuité

On souhaite évaluer l'intérêt du caractère compressif du limiteur (2.145) (en prenant $\varphi_i = \varphi_i^{\max}$) dans le cas du transport d'une discontinuité. Pour cela, on va comparer ses performances à celles de deux autres limiteurs :

- ▷ Le premier est le limiteur de Barth et Jespersen [6] qui est utilisé dans de nombreux codes CFD basés sur des méthodes volumes-finis sur maillages non-structurés. Avec les notations déjà définies précédemment, il s'exprime sous la forme suivante :

$$\varphi_i^{BJ} = \min_{j \in \mathcal{V}_i} \begin{cases} \frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{q_{ij} - q_i^n} & \text{si } q_{ij} > q_i^{n,\max} \\ \frac{q_i^{n,\min} - q_i^n}{q_{ij} - q_i^n} & \text{si } q_{ij} < q_i^{n,\min} \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.147)$$

Cette expression peut être reformulée sous la forme suivante :

$$\varphi_i^{BJ} = \min_{j \in \mathcal{V}_i} \begin{cases} \min \left(1, \max \left(0, \frac{q_i^{n,\min} - q_i^n}{\Delta q_{ij}}, \frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{\Delta q_{ij}} \right) \right) & \text{si } \Delta q_{ij} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.148)$$

D'après [7], ce limiteur assure le principe du maximum global pour le schéma (2.92) sous la condition CFL suivante :

$$\lambda_i \leq \frac{1}{\Theta_i^{geom} \bar{a}_i} \quad (2.149)$$

où \bar{a}_i est définie par :

$$\bar{a}_i = \frac{1}{|\partial\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} |a_{i,j}| |\Gamma_{ij}| \quad (2.150)$$

et Θ_i^{geom} est un paramètre dont la valeur dépend de la géométrie de la cellule Ω_i (voir Barth et Ohlberger [7] pour sa définition complète). Pour une cellule Ω_i triangulaire, on a $\Theta_i^{geom} = 3$ et pour une cellule carrée (cas d'un maillage cartésien et uniforme 2D par exemple) on a $\Theta_i^{geom} = 2$.

- ▷ Pour le second limiteur, nous proposons une variante du limiteur précédent (2.148) que nous appellerons dans la suite : *limiteur de Barth et Jespersen compressif*. Son expression est obtenue en supprimant la contrainte $\varphi_i \leq 1$ afin d'obtenir un limiteur similaire à celui que nous avons proposé en (2.145). Il s'écrit alors :

$$\varphi_i^{BJ,comp.} = \min_{j \in \mathcal{V}_i} \begin{cases} \max \left(0, \frac{q_i^{n,\min} - q_i^n}{\Delta q_{ij}}, \frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{\Delta q_{ij}} \right) & \text{si } \Delta q_{ij} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.151)$$

On remarquera que ce limiteur agit uniquement sur la valeur reconstruite au centre de chaque face \mathbf{B}_{ij} alors que le limiteur proposé (2.145) agit sur les valeurs reconstruites en \mathbf{B}_{ij} et en son symétrique \mathbf{B}'_{ij} (cf. Remarque 2). À priori, le limiteur (2.151) sera donc potentiellement moins contraignant que le limiteur (2.145).

Cas test du disque de Zalesak

Le premier cas test étudié est le disque de Zalesak [101] qui est couramment utilisé pour évaluer les méthodes de capture d'interface de type VOF et Level-Set. Dans un domaine de calcul bidimensionnel de taille $[0, L = 100]^2$, on définit un disque centré en $\{50, 75\}$, de rayon 15 et muni d'une fente de largeur 5 et de hauteur 25 (Figure 2.7). À l'instant initial $t = 0s$, on initialise une quantité q comme étant égale à 1 dans le disque fendu et à 0 par ailleurs. Pour $t > 0$, cette quantité est transportée par un champ de vitesse stationnaire et à divergence nulle qui est défini par :

$$\begin{cases} u_x = (\pi/314)(50 - y) \\ u_y = (\pi/314)(x - 50) \end{cases}$$

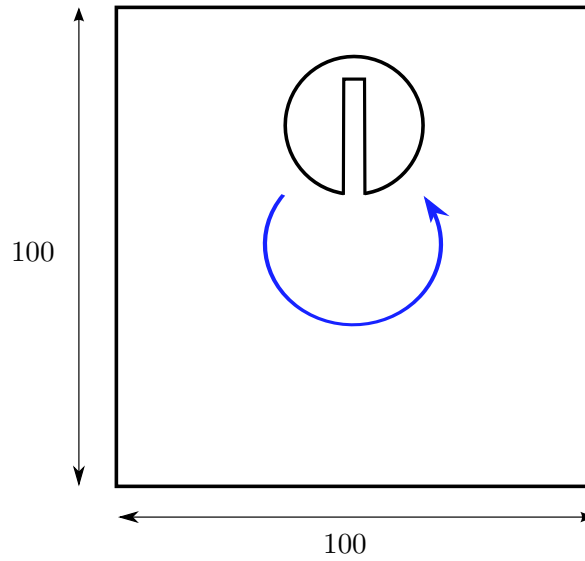


FIGURE 2.7 – Configuration géométrique du disque de Zalesak [101].

▷ Influence du maillage

Afin de tester les limiteurs sur différents types de cellule, nous avons effectué les simulations en considérant des maillages cartésiens uniformes et des maillages obtenus par une triangulation de Delaunay (cf. Figure 2.8). La convergence en maillage a été étudiée en considérant plusieurs résolutions spatiales : $\Delta x/L = 1/64, 1/128, 1/256$ ². À l'instant final $t_f = 628s$, le disque a effectué une rotation complète et la solution exacte est strictement identique à la solution initiale q^0 . Le pas de temps est calculé pour chaque maillage à partir de la condition de stabilité (2.114) et en prenant un nombre CFL de 0.2³.

Sur la Figure 2.9, nous avons superposé les solutions exactes et les solutions numériques obtenues pour les différents limiteurs et les différents maillages de type cartésien et uniforme. La Figure 2.10 montre les mêmes résultats obtenus dans le cas du maillage de type Delaunay.

Quelque soit le type de maillage, on remarque tout d'abord que la discontinuité de la solution est bien plus étalée avec le limiteur φ^{BJ} qu'avec les deux limiteurs compressifs. Ceci confirme l'intérêt d'utiliser de tels limiteurs dans le cas de transports d'un front discontinu.

On observe également que les limiteurs compressifs $\varphi^{BJ,comp.}$ et $\varphi^{comp.}$ donnent des résultats identiques dans le cas de maillages cartésiens et uniformes. Ceci est dû au fait que, pour

2. Dans le cas de la triangulation de Delaunay, les valeurs de Δx correspondent approximativement au diamètre moyen des cellules du maillage.

3. Le choix d'un nombre CFL bas permet de s'assurer que la condition de stabilité (2.149), associée au limiteur φ^{BJ} et $\varphi^{BJ,comp.}$, est également vérifiée.

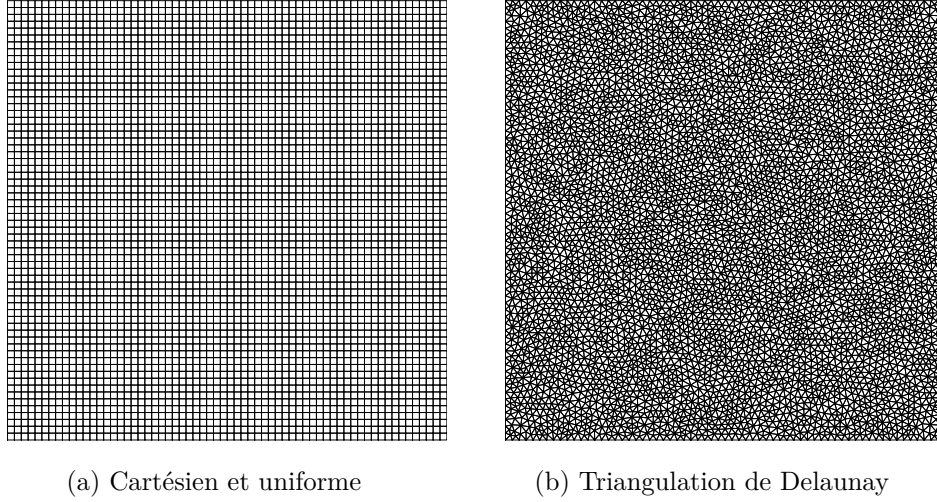


FIGURE 2.8 – Exemple de maillages utilisés pour la simulation du disque de Zalesak

des cellules carrées (où des cubes en 3D), le symétrique du centre d'une face par rapport au centre de la cellule est confondu avec le centre de la face opposée. En conséquence, la limitation des variables reconstruites par $\varphi^{BJ,comp.}$ et $\varphi^{comp.}$ est appliquée sur le même ensemble de points et les deux limiteurs dégènèrent vers une formulation équivalente. Dans le cas de maillages de type Delaunay, les résultats des limiteurs $\varphi^{BJ,comp.}$ et $\varphi^{comp.}$ sont différents. On remarque, en particulier, que le premier est le plus compressif mais que cette compression excessive a tendance à légèrement brouter l'interface (cf. Figure 2.10, Delaunay \approx 256).

D'un point de vue quantitatif, nous avons comparé l'évolution de l'erreur entre la solution exacte et la solution numérique en fonction de la résolution du maillage. L'expression de l'erreur est :

$$Err = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_c} |q_i^f - q_i^0| |\Omega_i| \quad (2.152)$$

Le taux de convergence spatiale du schéma numérique est alors donné par :

$$q = \frac{\ln(Err_{(2\Delta x)}) - \ln(Err_{(\Delta x)})}{\ln(2)} \quad (2.153)$$

L'ensemble des résultats de l'étude de convergence en maillage est présenté dans le [Tableau 2.1](#). On remarque que tous les limiteurs ont un ordre de convergence proche de l'unité, avec un avantage pour les limiteurs compressifs. Concernant les valeurs de l'erreur, celles obtenues avec le limiteur classique φ^{BJ} sont entre 2 à 4 fois plus importantes que celles obtenues avec les limiteurs compressifs $\varphi^{BJ,comp.}$ et $\varphi^{comp.}$ pour un maillage donné.

▷ Influence du CFL

Une étude qualitative de l'influence du pas de temps sur la capture de l'interface a été effectuée pour le limiteur compressif $\varphi^{comp.}$. Pour cela, nous avons réalisé plusieurs simulations en faisant varier uniquement la valeur du CFL pour un maillage donné. La [Figure 2.11](#) montre les résultats obtenus pour les différents CFL considérés avec un maillage cartésien uniforme et un maillage de type Delaunay. On observe que, contrairement au schéma CICSAM qui diffuse dès que la valeur du CFL est typiquement supérieure à 0.5 [92], l'interface n'est pas étalée quelque soit la valeur du pas de temps. Toutefois, l'interface semble sujette à des distorsions relativement importantes pour des valeurs du CFL supérieures à 0.7. En pratique, on a donc

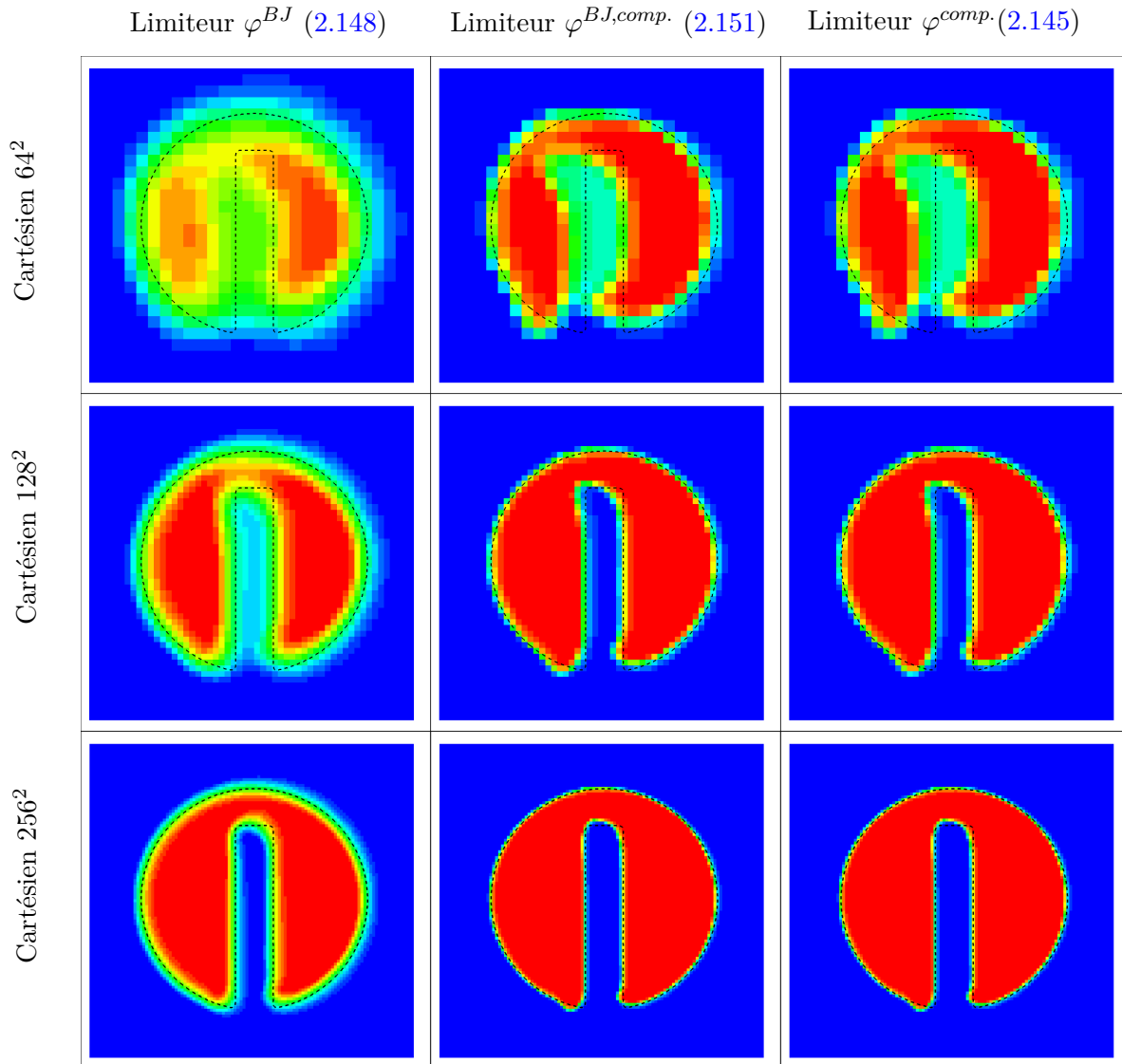


FIGURE 2.9 – Résultats des simulations du disque de Zalesak après une rotation, obtenus avec des maillages cartésiens et uniformes. Échelle de couleur : solution numérique (bleu : $q = 0$, rouge : $q = 1$), - - solution exacte.

Type de maillage	Résolution $L/\Delta x$	φ^{BJ}		$\varphi^{BJ,comp.}$		$\varphi^{comp.}$	
		<i>Err</i>	q	<i>Err</i>	q	<i>Err</i>	q
Cartésien	64^2	2.88e-2	—	1.60e-2	—	1.60e-2	—
	128^2	1.71e-2	0.75	5.56e-3	1.52	5.56e-3	1.52
	256^2	9.05e-3	0.92	2.78e-3	1.00	2.78e-3	1.00
Delaunay	$\approx 64^2$	1.80e-2	—	5.92e-3	—	1.06e-2	—
	$\approx 128^2$	1.00e-2	0.85	2.75e-3	1.11	4.58e-3	1.21
	$\approx 256^2$	5.71e-3	0.81	1.80e-3	0.87	2.29e-3	1.00

Tableau 2.1 – Étude de la convergence en maillage pour la simulation du disque de Zalesak avec les différents limiteurs.

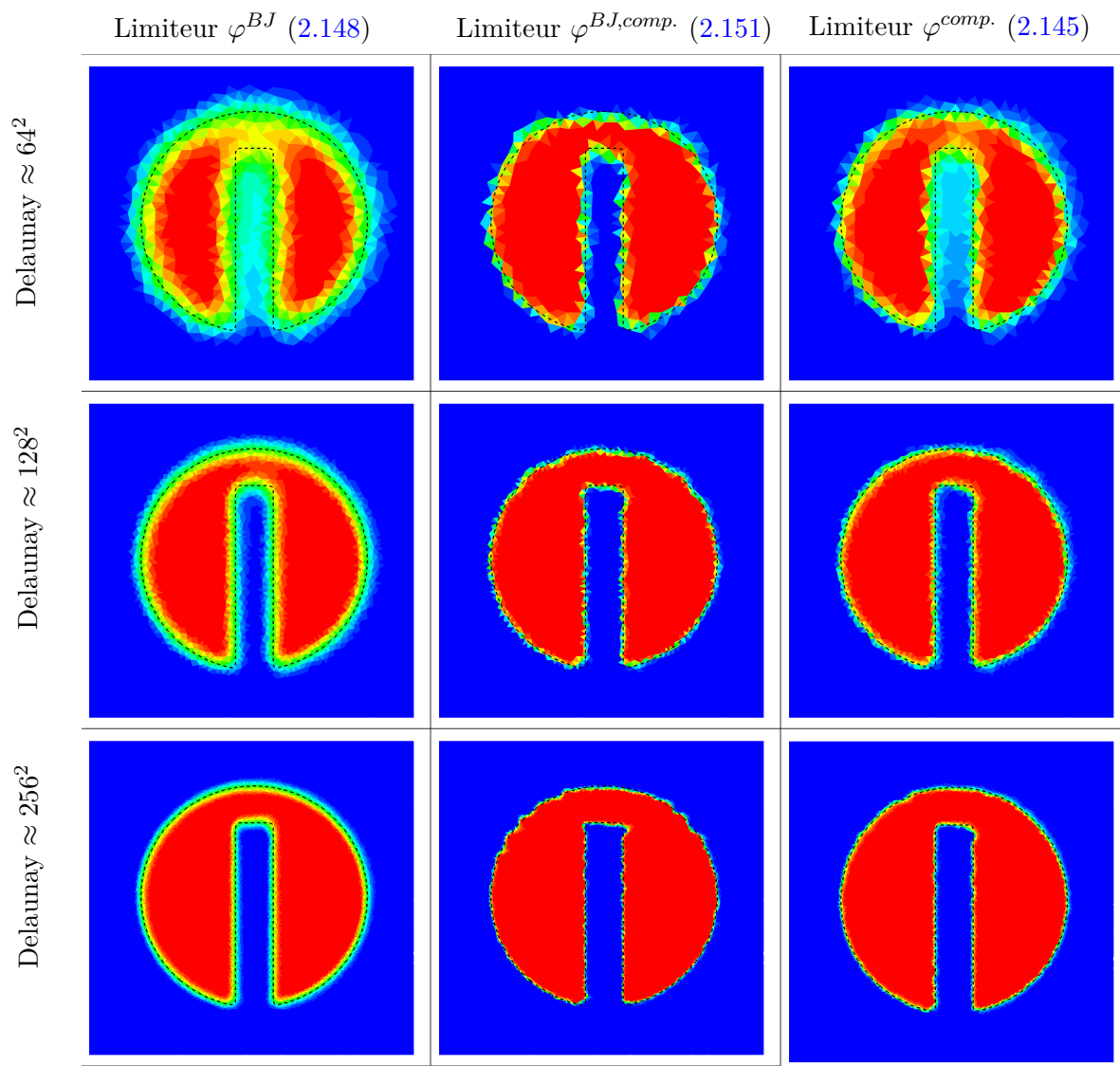


FIGURE 2.10 – Résultats des simulations du disque de Zalesak après une rotation, obtenus avec des maillages de type Delaunay. Échelle de couleur : solution numérique (bleu : $q = 0$, rouge : $q = 1$), - - solution exacte.

choisi des valeurs de CFL inférieures à 0.7 pour toutes les simulations présentées dans la suite du manuscrit.

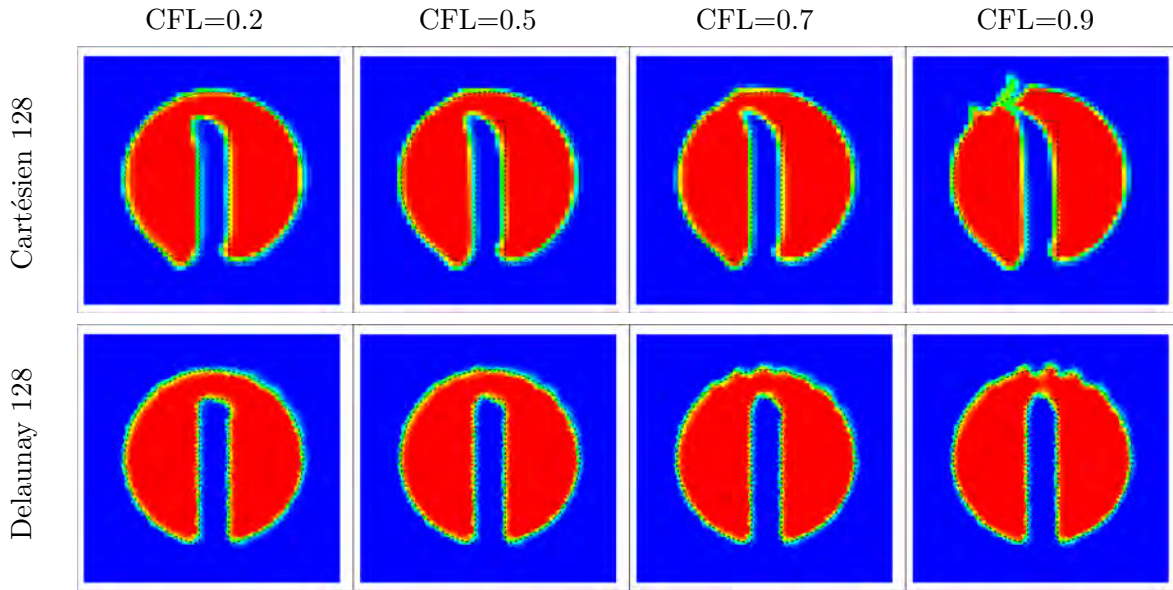


FIGURE 2.11 – Influence de la valeur du pas du temps Δt sur la résolution du disque de Zalesak avec le limiteur compressif proposé φ^{comp} . Échelle de couleur : solution numérique (bleu : $q = 0$, rouge : $q = 1$), - - solution exacte.

Cas test du serpentín

Comme pour le cas test précédent, celui-ci est très largement utilisé pour évaluer la qualité des méthodes de suivi d'interface. Ce cas test consiste à étirer un cercle placé dans un champ de vitesse cisaillant et à divergence nulle jusqu'à l'obtention d'un long et fin ligament. Plus l'étirement est important, plus la capture de l'interface est difficile en raison de l'épaisseur du ligament qui diminue jusqu'à devenir de l'ordre du pas de résolution du maillage. Cela entraîne généralement des ruptures artificielles de l'interface dans le cas des méthodes VOF ou des pertes de masse dans le cas des méthodes Level-Set [21, 102]. Pour les méthodes sans reconstruction d'interface, la sous-résolution spatiale se traduit par un étalement excessif de l'interface dû à la diffusion numérique du schéma. Dans ce contexte, l'utilisation de limiteurs compressifs peut présenter un intérêt important pour contrebalancer cet effet.

Pour la configuration géométrique du cas test, on considère un domaine carré de dimension $[0, 1]^2$ dans lequel est placé, à l'instant initial, un cercle de rayon 0.15 et de centre (0.5, 0.75). Le champ de vitesse stationnaire est défini par le potentiel suivant :

$$\psi = \frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y) \quad (2.154)$$

Les composantes u et v de la vitesse sont ainsi définies par :

$$\begin{cases} u(x, y) = -2 \sin^2(\pi x) \sin(\pi y) \cos(\pi y) \\ v(x, y) = 2 \sin^2(\pi y) \sin(\pi x) \cos(\pi x) \end{cases} \quad (2.155)$$

Comme pour le cas test du disque de Zalesak, on effectue des simulations avec des maillages cartésiens et uniformes et avec des maillages obtenus par une triangulation de Delaunay. Le pas de temps est calculé à partir de la condition de stabilité (2.114) et en prenant un

nombre CFL de 0.2. Au temps final $t_f = 3s$, nous avons superposé l'interface de la solution de référence⁴ et celle de la solution numérique représentée par l'iso-contour $\alpha = 0.5$ de la solution numérique (cf. Figure 2.12 et Figure 2.13). On observe clairement que le ligament est mieux préservé lorsqu'on utilise des limiteurs compressifs. En effet, ceux-ci réduisent de manière importante la diffusion artificielle de l'interface et sont capables de maintenir des fronts sur 1 à 3 cellules.

Bilan des cas tests

Les deux cas tests précédents ont mis en évidence l'intérêt de l'utilisation d'un limiteur compressif dans le cadre d'une méthode MUSCL pour la résolution d'une équation de transport d'un champ discontinu. Nous avons constaté que ces limiteurs permettent de maintenir l'épaisseur du front sur 2 ou 3 mailles. Cette capacité permet d'améliorer la description des petites structures soumises à des déformations complexes au cours de leur transport. En ce qui concerne la comparaison entre les deux limiteurs compressifs $\varphi^{BJ,comp.}$ et $\varphi^{comp.}$, nous avons observé qu'ils sont équivalents pour des maillages cartésiens et uniformes. Toutefois, dans le cas général, le premier est le plus compressif mais aussi celui qui conduit à de plus grandes distorsions de l'interface. Pour ces raisons, le second limiteur semble être un meilleur compromis et il y a donc été retenu dans la suite des travaux.

2.2.8.4 Limiteur retenu pour le modèle bifluide

Comme nous l'avons précisé précédemment, la reconstruction de la solution discrète est effectuée pour l'ensemble des variables naturelles $\mathbf{u}_i^n = (\rho_l|_i^n, \rho_g|_i^n, \alpha_l|_i^n, \mathbf{v}|_i^n)$ de chaque cellule Ω_i . Pour le champ de fraction volumique du liquide $\alpha_l|_i^n$ que l'on souhaite garder pseudo-discontinu au niveau de l'interface, on utilise le limiteur compressif (2.145) qui a été développé dans le paragraphe précédent pour le transport d'une discontinuité. Pour les autres champs variant continûment en espace, on utilise aussi le même limiteur en ajoutant toutefois une contrainte de "préservation de la linéarité" en imposant $\varphi_i^{comp.} \leq 1$.

En regroupant les deux situations (avec et sans préservation de la linéarité), le limiteur peut s'exprimer sous la forme unique :

$$\varphi_i^{comp.} = \begin{cases} \min \left(K, \frac{q_i^n - q_i^{n,\min}}{|\Delta q_i|^{\max}}, \frac{q_i^{n,\max} - q_i^n}{|\Delta q_i|^{\max}} \right) & \text{si } |\Delta q_i|^{\max} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.156)$$

où :

$$\begin{cases} K = +\infty & \text{pour la variable discrète } \alpha_l \\ K = 1 & \text{pour les variables discrètes } \rho_l, \rho_g, \mathbf{v} \end{cases}$$

2.2.9 Résolution numérique du système discret

Le système discret (2.67) peut formellement s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^n}{\Delta t^n} = \mathbf{R}^{\mathbf{q}}(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{v}^n) & (2.157) \\ \frac{\rho^{n+1} \mathbf{v}^{n+1} - \rho^n \mathbf{v}^n}{\Delta t^n} = \mathbf{R}^{\mathbf{v}}(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{v}^n) & (2.158) \end{cases}$$

4. La solution de référence a été obtenue par une méthode lagrangienne de suivi d'interface. L'interface a été représentée par 100000 marqueurs et l'équation de transport de chaque marqueur a été résolue avec une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 et avec un CFL de 0.01.

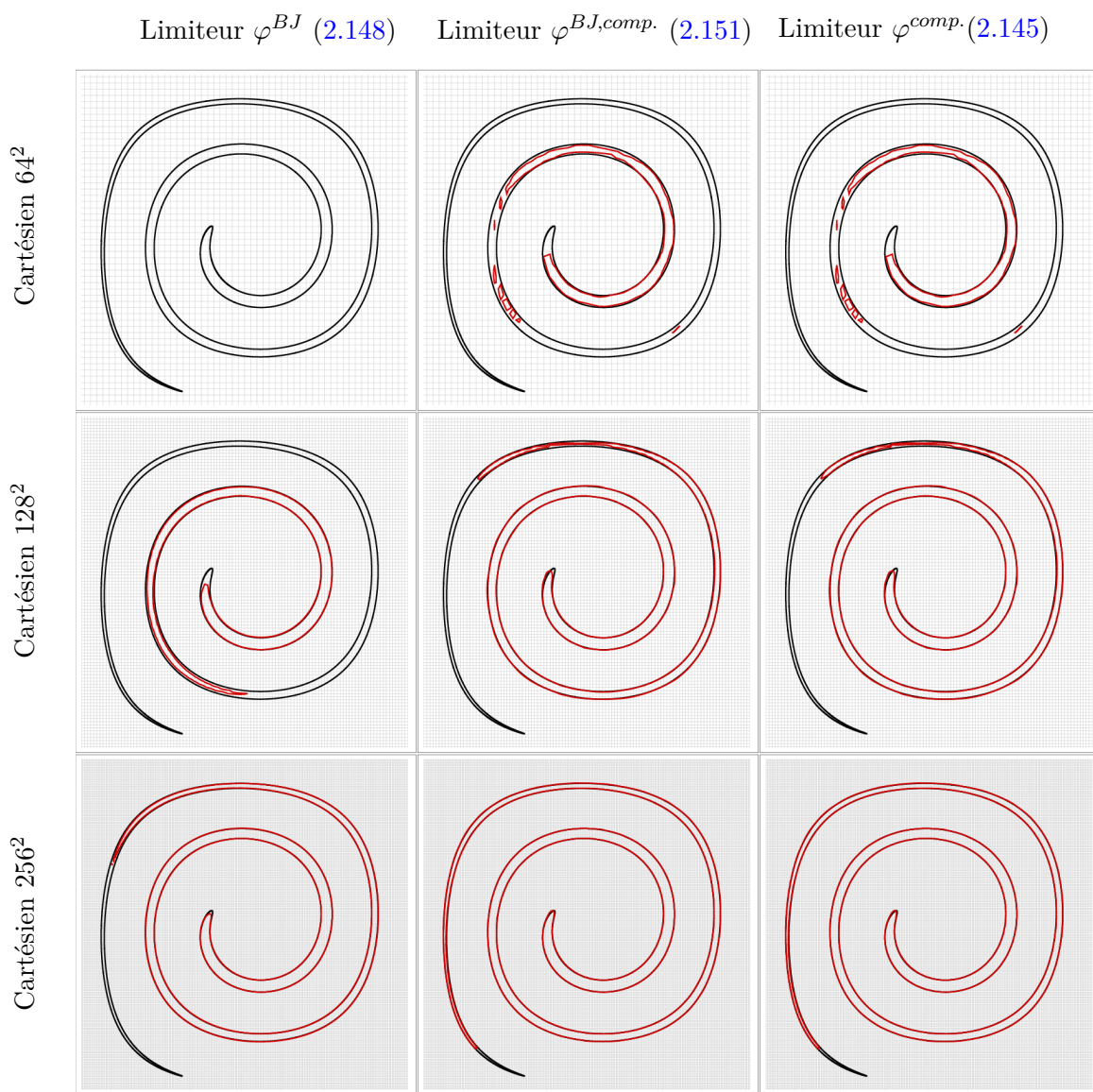


FIGURE 2.12 – Résultats pour le cas test du serpent à $t = 3s$ obtenus avec des maillages cartésiens et uniformes. *En noir* : solution de référence ; *en rouge* : iso-contour $q = 0.5$ de la solution numérique

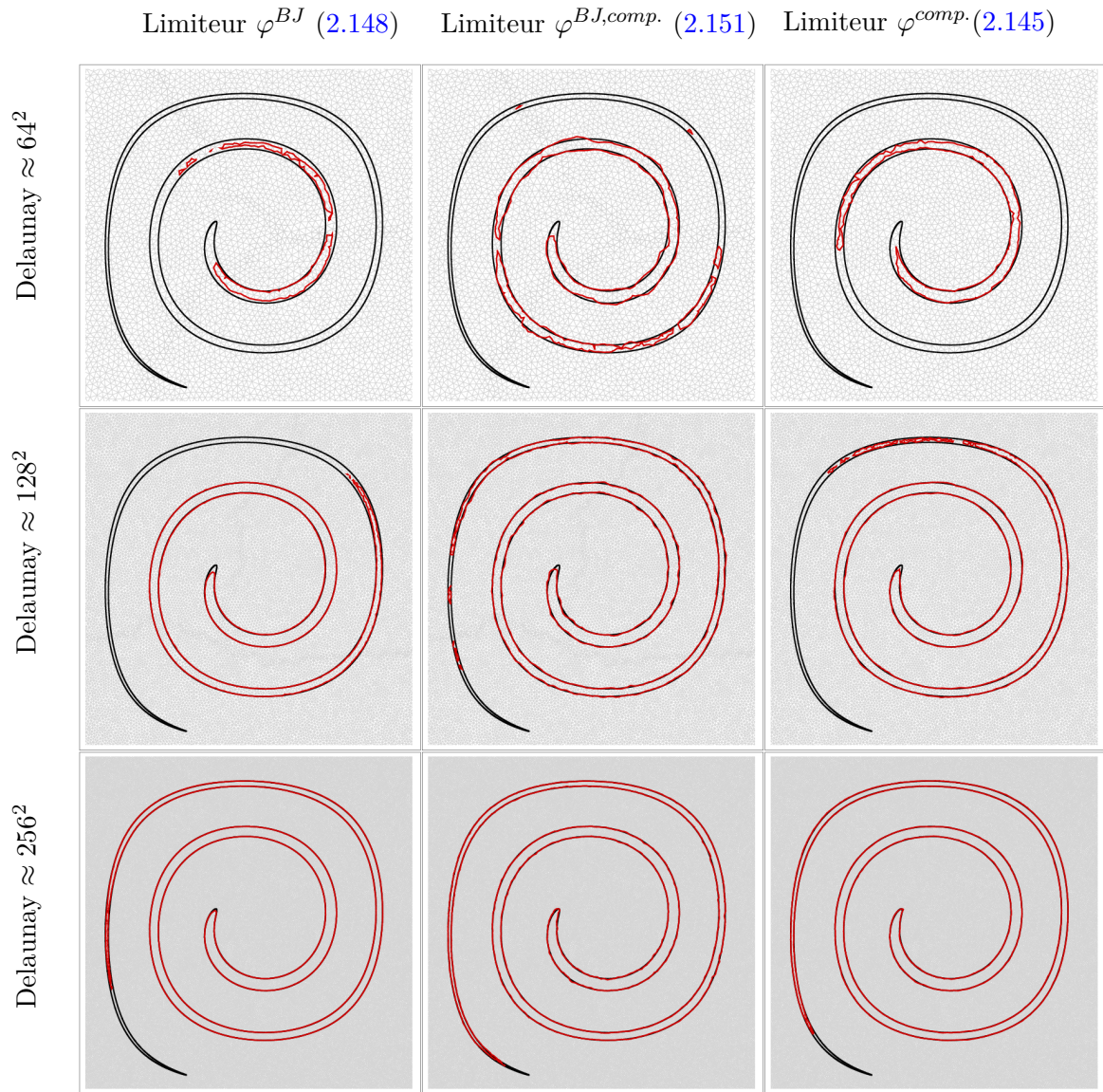


FIGURE 2.13 – Résultats pour le cas test du serpent à $t = 3s$ obtenus avec des maillages de type Delaunay. *En noir* : solution de référence ; *en rouge* : iso-contour $q = 0.5$ de la solution numérique

où, pour rappel, on a $\boldsymbol{\varrho}^n = {}^t(\tilde{\rho}_g|n, \tilde{\rho}_l|n)$ et $\rho|n = \tilde{\rho}_g|n + \tilde{\rho}_l|n$.

La résolution du système (2.157)-(2.158) est faite en deux étapes successives :

▷ *Étape 1 : Résolution de l'équation (2.157).*

Cette équation non-linéaire et implicite est résolue par une méthode d'Euler implicite linéarisée qui consiste à linéariser le second membre en se basant sur un développement en série de Taylor à l'ordre 1 autour de l'instant t^n :

$$\mathbf{R}^{\boldsymbol{\varrho}}(\boldsymbol{\varrho}^{n+1}, \mathbf{v}^n) = \mathbf{R}^{\boldsymbol{\varrho}}(\boldsymbol{\varrho}^n, \mathbf{v}^n) + \mathbf{J}^{\boldsymbol{\varrho}}|n(\boldsymbol{\varrho}^{n+1} - \boldsymbol{\varrho}^n) + \mathcal{O}\left((t^{n+1} - t^n)^2\right) \quad (2.159)$$

où $\mathbf{J}^{\boldsymbol{\varrho}}|n = \frac{\partial \mathbf{R}^{\boldsymbol{\varrho}}}{\partial \boldsymbol{\varrho}}(\boldsymbol{\varrho}^n, \mathbf{v}^n)$. En pratique, le stockage et le calcul de la matrice jacobienne exacte $\mathbf{J}^{\boldsymbol{\varrho}}|n$ peut être très coûteux. Pour cette raison, on utilise une approximation $\mathcal{J}^{\boldsymbol{\varrho}}|n$ de celle-ci en ne considérant que les termes d'ordre 1 (c'est-à-dire, ceux qui ne dépendent uniquement que du premier voisinage de chaque cellule). On a alors :

$$\mathbf{R}^{\boldsymbol{\varrho}}(\boldsymbol{\varrho}^{n+1}, \mathbf{v}^n) \approx \mathbf{R}^{\boldsymbol{\varrho}}(\boldsymbol{\varrho}^n, \mathbf{v}^n) + \mathcal{J}^{\boldsymbol{\varrho}}|n(\boldsymbol{\varrho}^{n+1} - \boldsymbol{\varrho}^n) \quad (2.160)$$

En substituant (2.160) dans (2.157), on obtient :

$$\underbrace{(I - \Delta t^n \mathcal{J}^{\boldsymbol{\varrho}}|n)}_A \underbrace{(\boldsymbol{\varrho}^{n+1} - \boldsymbol{\varrho}^n)}_{\delta \boldsymbol{\varrho}} = \underbrace{\Delta t^n \mathbf{R}^{\boldsymbol{\varrho}}(\boldsymbol{\varrho}^n, \mathbf{v}^n)}_B \quad (2.161)$$

Le système (2.161) est un système d'équations linéaires de la forme $A \delta \boldsymbol{\varrho} = B$, où A est une matrice non-symétrique et creuse. L'inversion de ce système pour trouver $\delta \boldsymbol{\varrho}$ est effectuée par un solveur itératif BICGSTAB [96] avec un préconditionneur bloc-Jacobi. Une fois $\delta \boldsymbol{\varrho}$ calculé, la solution à l'instant t^{n+1} est obtenue en faisant $\boldsymbol{\varrho}^{n+1} = \boldsymbol{\varrho}^n + \delta \boldsymbol{\varrho}$.

▷ *Étape 2 : Résolution de l'équation (2.158).*

Connaissant $\boldsymbol{\varrho}^{n+1} = {}^t(\tilde{\rho}_g|^{n+1}, \tilde{\rho}_l|^{n+1})$, on en déduit ρ^{n+1} et on peut calculer directement $\mathbf{R}^{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\varrho}^{n+1}, \mathbf{v}^n)$. Ensuite, on est en mesure d'obtenir la vitesse à l'instant t^{n+1} en effectuant simplement :

$$\mathbf{v}^{n+1} = \left[\text{diag}(\rho^{n+1}) \right]^{-1} \left(\rho^n \mathbf{v}^n + \Delta t^n \mathbf{R}^{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\varrho}^{n+1}, \mathbf{v}^n) \right) \quad (2.162)$$

2.3 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté le modèle bifluide dédié à la description de l'écoulement dans la zone d'atomisation primaire proche de l'injecteur. Celui-ci est basé sur les équations de Navier-Stokes écrites pour deux fluides compressibles (barotropes), non-miscibles et supposés newtoniens. À partir des hypothèses de non-glissement et de l'équilibre local des pressions entre les fluides, le système de lois de conservation obtenu est composé d'une équation de conservation de la masse pour chaque fluide et d'une équation de conservation de la quantité de mouvement pour le pseudo-mélange des deux fluides. L'interface entre les deux fluides est considérée comme une zone de transition continue (*modèle à interface diffuse*) où les propriétés du milieu varient continument. Les effets de tension de surface sont pris en compte par une approche CSS en modélisant ceux-ci par un terme source volumique supplémentaire dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement du pseudo-mélange.

Les méthodes numériques utilisées pour la résolution du modèle bifluide ont également été présentées dans ce chapitre. Elles sont basées sur une discrétisation colocalisée de type volumes-finis sur maillage non-structuré permettant d'effectuer des simulations avec des géométries complexes. Sachant que l'écoulement est à faible nombre de Mach dans les applications visées, un schéma bas-Mach est utilisé pour la discrétisation de la partie hyperbolique du système de lois de conservation. Celui-ci est étendu à l'ordre 2 en espace grâce à une méthode MUSCL avec un limiteur de gradient discret compressif qui permet de limiter l'étalement artificiel de l'interface entre les deux fluides.

Chapitre 3

Modèle de spray pour la description du brouillard de gouttes

Sommaire

3.1	Modélisation continue d'un spray à l'aide d'une équation cinétique	73
3.1.1	Hypothèses du modèle	73
3.1.2	Notations	74
3.1.3	Équations générales du spray	74
3.1.3.1	Expression des forces agissant sur une goutte	75
3.1.4	Couplage de l'écoulement porteur avec le spray	76
3.2	Discrétisation numérique	77
3.2.1	Discrétisation de l'espace des phases par une méthode particulaire	77
3.2.1.1	Principe général	77
3.2.1.2	Équations de transport des particules numériques	78
3.2.1.3	Terme de couplage avec le fluide porteur	78
3.2.2	Discrétisation temporelle	78
3.2.3	Interpolation des propriétés du fluide porteur	80
3.2.4	Conditions aux limites pour les particules numériques	81
3.2.5	Conditions d'injection des particules numériques	81
3.3	Conclusion du chapitre	82

Dans ce chapitre, nous présentons le modèle développé pour décrire le transport d'un spray issu de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée. L'objectif principal de ce développement était de disposer d'un modèle de spray simplifié permettant d'étudier et de mettre en place une méthodologie de couplage entre un modèle de spray et le modèle bifluide décrit au chapitre précédent (cf §2).

En premier lieu, nous présentons les hypothèses et les équations du modèle de spray que nous avons retenues. Ensuite, nous décrivons les étapes de discrétisation du modèle permettant sa mise en œuvre numérique.

3.1 Modélisation continue d'un spray à l'aide d'une équation cinétique

3.1.1 Hypothèses du modèle

En aval de la zone d'atomisation primaire d'une nappe liquide cisailée, la phase liquide forme un brouillard de gouttes qui interagit avec l'écoulement gazeux environnant. La phase

liquide peut donc être considérée comme une phase dispersée (spray) et le fluide porteur comme une phase continue.

En ce qui concerne la modélisation de la phase gazeuse continue, celle-ci est basée sur les équations de Navier-Stokes monophasiques. Comme le modèle bifluide présenté au chapitre §2 dégénère, par construction, vers les équations de Navier-Stokes monophasiques lorsque la fraction volumique du liquide α_l tend vers zéro, nous avons conservé ce modèle pour la description de la phase gazeuse.

Pour la modélisation de la phase liquide dispersée, un modèle spécifique a été développé pour décrire la dynamique du spray de gouttes. Ce modèle a été construit à partir des hypothèses simplificatrices suivantes :

- (H1) : Toutes les gouttes sont supposées être des sphères indéformables. Ainsi, le diamètre d_p d'une goutte (ou de son rayon r_p) suffit à caractériser sa géométrie.
- (H2) : Le ratio de densité entre le liquide et le gaz est supposé très grand : $\rho_p/\rho_g \gg 1$.
- (H3) : L'écoulement est supposé suffisamment dilué pour que les collisions entre les gouttes soient négligeables.
- (H4) : L'écoulement est supposé suffisamment dilué pour que le volume occupé par les gouttes dans l'écoulement porteur puisse être négligé.
- (H5) : L'évaporation des gouttes est négligée (on ne s'intéresse qu'aux aspects dynamiques).
- (H6) : L'influence des échelles non résolues de la turbulence de l'écoulement porteur sur une goutte est négligée.
- (H7) : **La fragmentation secondaire des gouttes n'est pas prise en compte.**

L'hypothèse (H7) est une hypothèse forte qui peut sembler antagoniste à la volonté de modéliser et simuler l'ensemble du processus d'atomisation d'une nappe liquide (qui inclut aussi la fragmentation secondaire des gouttes). Toutefois, dans le cadre de cette thèse, cette hypothèse est faite car nous avons axé nos développements sur la simulation numérique des mécanismes d'atomisation primaire et sur la méthodologie de couplage du modèle bifluide et du modèle de spray. Cette hypothèse est d'autant plus justifiée que de nombreux modèles d'atomisation secondaire sont déjà utilisés dans des codes industriels (comme par exemple dans les solveurs SPARTE et SPRIREE du code CEDRE de l'ONERA).

3.1.2 Notations

Pour écrire les équations du modèle de spray, il est nécessaire d'introduire de nouvelles notations. Ainsi, dans la suite du chapitre, les grandeurs physiques associées aux gouttes sont indicées avec la lettre " p " (comme *particule*). Les grandeurs associées au fluide porteur (la phase gazeuse en l'occurrence) seront indicées avec la lettre " f " pour "fluide porteur".

Ainsi, on note \mathbf{x}_p la position d'une goutte, \mathbf{v}_p sa vitesse, r_p (*resp.* d_p) son rayon (*resp.* son diamètre). Pour le fluide porteur, on note ρ_f sa densité et \mathbf{v}_f sa vitesse.

3.1.3 Équations générales du spray

Dans une chambre de combustion, le nombre de gouttes produites par le processus d'atomisation est trop élevé pour qu'il soit envisageable de simuler le comportement individuel de chaque goutte de manière déterministe. Le spray est donc décrit avec une approche statistique en introduisant une fonction scalaire $f^{(p)}$ représentant la densité moyenne (au sens statistique) de gouttes dans l'espace des phases. Cette fonction est définie telle que $f^{(p)}(t, \mathbf{x}_p, \mathbf{v}_p, r_p) d\mathbf{x}_p d\mathbf{v}_p dr_p$ représente le nombre moyen de gouttes dans le volume $[\mathbf{x}_p, \mathbf{x}_p + d\mathbf{x}_p]$, avec un rayon compris dans l'intervalle $[r_p, r_p + dr_p]$ et une vitesse comprise dans l'intervalle $[\mathbf{v}_p, \mathbf{v}_p + d\mathbf{v}_p]$ à l'instant t .

L'évolution de la fonction $f^{(p)}$ est décrite par l'équation proposée par Williams [100] de la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (f^{(p)}) + \nabla_x \cdot (\mathbf{v}_p f^{(p)}) + \nabla_v \cdot \left(\frac{\mathbf{F}_p}{m_p} f^{(p)} \right) + \frac{\partial}{\partial r} (\mathcal{R} f^{(p)}) = Q_{coll.} + Q_{frag.} \quad (3.1)$$

où :

- ▷ \mathbf{F}_p désigne les forces extérieures agissant sur une goutte.
- ▷ m_p désigne la masse d'une goutte : $m_p = \rho_p \pi d_p^3 / 6$
- ▷ \mathcal{R} désigne le taux d'évaporation d'une goutte.
- ▷ $Q_{coll.}$ est un terme modélisant les collisions binaires entre les gouttes.
- ▷ $Q_{frag.}$ est un terme modélisant la fragmentation des gouttes induite par les forces aérodynamiques.

En se plaçant dans le cadre des hypothèses décrites au paragraphe §3.1.1, l'équation (3.1) se simplifie sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (f^{(p)}) + \nabla_x \cdot (\mathbf{v}_p f^{(p)}) + \nabla_v \cdot \left(\frac{\mathbf{F}_p}{m_p} f^{(p)} \right) = 0 \quad (3.2)$$

L'équation (3.2) portant sur la fonction $f^{(p)}$ permet d'obtenir une description complète de l'évolution du spray à l'échelle mésoscopique. Connaissant la densité en nombre de gouttes, il est possible de calculer les moments de la fonction $f^{(p)}$ afin de remonter aux grandeurs macroscopiques locales qui caractérisent le spray comme, par exemple, la densité volumique de gouttes n_p , la fraction volumique occupée par les gouttes α_p et la vitesse moyenne des gouttes $\overline{\mathbf{v}_p}$:

$$n_p = \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^3} f^{(p)}(t, \mathbf{x}_p, \mathbf{v}_p, r_p) d\mathbf{v}_p dr_p \quad (3.3)$$

$$\alpha_p = \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{4\pi r_p^3}{3} f^{(p)}(t, \mathbf{x}_p, \mathbf{v}_p, r_p) d\mathbf{v}_p dr_p \quad (3.4)$$

$$\overline{\mathbf{v}_p} = \frac{1}{\alpha_p} \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{4\pi r_p^3}{3} \mathbf{v}_p f^{(p)}(t, \mathbf{x}_p, \mathbf{v}_p, r_p) d\mathbf{v}_p dr_p \quad (3.5)$$

Pour obtenir une description complète du modèle, il reste à préciser l'expression des forces extérieures agissant sur une goutte \mathbf{F}_p dans l'équation (3.2).

3.1.3.1 Expression des forces agissant sur une goutte

Dans les applications visées, les forces extérieures considérées sont la force de traînée $\mathbf{F}_{p,t}$ qu'exerce le fluide porteur sur la goutte et la force de pesanteur $\mathbf{F}_{p,g}$:

$$\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_{p,t} + \mathbf{F}_{p,g} \quad (3.6)$$

L'expression de la force de pesanteur pour une goutte p est définie par :

$$\mathbf{F}_{p,g} = m_p \mathbf{g} \quad (3.7)$$

où \mathbf{g} est l'accélération gravitationnelle terrestre (en $m.s^{-2}$).

La force de traînée $\mathbf{F}_{p,t}$ s'exerçant sur une goutte p supposée sphérique a pour expression :

$$\mathbf{F}_{p,t} = \frac{1}{2} \pi \rho_{f@p} r_p^2 C_d \|\mathbf{v}_{f@p} - \mathbf{v}_p\| (\mathbf{v}_{f@p} - \mathbf{v}_p) \quad (3.8)$$

où $\rho_{f@p}$ est la densité volumique de masse du fluide de l'écoulement porteur à la position \mathbf{x}_p de la goutte, $\mathbf{v}_{f@p}$ est la vitesse du fluide de l'écoulement porteur à la position \mathbf{x}_p de la goutte et C_d est le coefficient de traînée.

Pour donner l'expression du coefficient de traînée d'une goutte, on définit le nombre de Reynolds particulaire Re_p :

$$Re_p = \frac{d_p \|\mathbf{v}_{f@p} - \mathbf{v}_p\|}{\mu_{f@p}} \quad (3.9)$$

où $\mu_{f@p}$ est la viscosité cinématique du fluide porteur à la position \mathbf{x}_p de la goutte. Pour de très faibles nombres de Reynolds particulières, on peut négliger les termes inertiels non-linéaires dans les équations de Navier-Stokes (on obtient alors les équations de Stokes) et en déduire l'expression exacte du coefficient de traînée pour le régime de Stokes que l'on note $C_d^{St.}$:

$$C_d^{St.} = \frac{24}{Re_p} \quad (3.10)$$

Pour des nombres de Reynolds particulières plus élevés, Schiller et Naumann [82] proposent une correction du coefficient de traînée C_d à partir d'une corrélation semi-empirique :

$$C_d(Re_p) = (1 + f(Re_p)) C_d^{St.} \quad \text{pour } Re_p \leq 1000 \quad (3.11)$$

où :

$$f(Re_p) = 0.15 Re_p^{0.687} \quad (3.12)$$

Finalement, la force de traînée $\mathbf{F}_{p,t}$ qui s'applique à une goutte p peut s'exprimer sous la forme :

$$\mathbf{F}_{p,t} = m_p \frac{(\mathbf{v}_{f@p} - \mathbf{v}_p)}{\tau_p} \quad (3.13)$$

où τ_p est le temps de relaxation de la goutte p défini par :

$$\tau_p = [1 + f(Re_p)]^{-1} \tau_p^{St.} \quad (3.14)$$

avec $\tau_p^{St.}$ désignant le temps de relaxation de la goutte p pour le régime de Stokes :

$$\tau_p^{St.} = \frac{\rho_p d_p^2}{18 \mu_{f@p}} \quad (3.15)$$

3.1.4 Couplage de l'écoulement porteur avec le spray

La prise en compte de l'influence du spray sur l'écoulement porteur¹ est réalisée en introduisant des termes sources dans les équations de conservation qui régissent le fluide porteur. En l'absence d'évaporation des gouttes, la prise en compte de l'influence des gouttes sur le fluide porteur se traduit par l'ajout d'un terme source de quantité de mouvement dû à la force de traînée.

Dans cette étude, l'écoulement porteur est gouverné par le système d'équations (2.36) du modèle bifluide. En ajoutant le terme source de traînée induite par les gouttes, noté $\mathbf{s}_{trainée}$, le système (2.36) devient :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{H} = \nabla \cdot (\mathcal{C} + \mathcal{V}) + \mathbf{s}_g + \mathbf{s}_{trainée} \quad (3.16)$$

1. On parle généralement de "two-way coupling", en anglais

où le terme source $\mathbf{s}_{trainée}$ a pour expression :

$$\mathbf{s}_{trainée} = \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \int \int_{\mathbb{R} + \mathbb{R}^3} -\mathbf{F}_{p,t} f^{(p)} d\mathbf{v}_p dr_p \end{array} \right\} \quad (3.17)$$

3.2 Discrétisation numérique

La dimension de l'espace des phases intervenant dans l'équation (3.2) décrivant l'évolution de $f^{(p)}$ est très grande. Par conséquent, la résolution de cette équation avec des méthodes eulériennes de type volumes-finis ou différences-finies implique des coûts de calcul importants. La résolution numérique de l'équation (3.2) a donc été faite en utilisant une méthode lagrangienne alternative, appelée méthode particulaire. On présente dans le paragraphe suivant le principe général de cette méthode.

3.2.1 Discrétisation de l'espace des phases par une méthode particulaire

3.2.1.1 Principe général

L'équation (3.2) peut s'écrire sous la forme générale :

$$\frac{\partial}{\partial t} (f^{(p)}) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot (\mathbf{a}(t, \boldsymbol{\xi}) f^{(p)}) = 0 \quad (3.18)$$

avec $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^8$, $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{E}$ et $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^7$. Le principe de la méthode particulaire consiste à chercher une solution de l'équation (3.18) sous la forme :

$$f_N^{(p)}(t) = \sum_{k=1}^N w_{p,k}(t) \delta(\boldsymbol{\xi}(t) - \boldsymbol{\xi}_k(t)) \quad (3.19)$$

L'approximation $f_N^{(p)}$ est un échantillonnage dans l'espace des phases de la fonction $f^{(p)}$. Cet échantillonnage est réalisé par une somme pondérée de N fonctions de Dirac. À l'instant $t = 0$, il convient de choisir les poids $w_{p,k}(0)$ et les nœuds $\boldsymbol{\xi}_k(0)$ de sorte que $f_N^{(p)}(0)$ soit une bonne approximation au sens faible de la donnée initiale $f^{(p)}(0, \boldsymbol{\xi})$, ce qui en pratique revient à échantillonner $f^{(p)}(0, \boldsymbol{\xi})$.

On rappelle que la convergence faible d'une suite de mesure discrète de la forme $f_N^{(p)}(t) = \sum_{k=1}^N w_{p,k}(t) \delta(\boldsymbol{\xi}(t) - \boldsymbol{\xi}_k(t))$ vers une fonction $f^{(p)}(t, \boldsymbol{\xi})$ signifie mathématiquement que :

$$\forall \varphi \in C^0(\mathcal{E}), \quad \sum_{k=1}^N w_{p,k}(t) \varphi(\boldsymbol{\xi}_k(t)) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \int_{\mathcal{E}} f^{(p)}(t, \boldsymbol{\xi}) \varphi(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (3.20)$$

On peut montrer que l'approximation (3.19) de $f^{(p)}$ est solution du problème (3.18)-(3.19) si et seulement si les nœuds $\boldsymbol{\xi}_k(t)$ et les poids $w_{p,k}(t)$ de la formule de quadrature vérifient le système lagrangien suivant :

$$\forall k \in \llbracket 1, \mathcal{N}_p \rrbracket, \quad t \geq 0, \quad \begin{cases} \frac{d}{dt} (\boldsymbol{\xi}_k(t)) = \mathbf{a}(t, \boldsymbol{\xi}_k(t)) & (3.21a) \\ w_{p,k}(t) = w_{p,k}(0) & (3.21b) \end{cases}$$

De part la nature des équations du système (3.21), les nœuds de la quadrature se "déplacent" dans l'espace des phases comme le feraient des particules réelles, d'où le nom de "particule numérique" souvent attribué à chaque nœud. Le système (3.21) décrit alors les équations d'évolution de N particules numériques. Chaque particule numérique k a un poids numérique $w_{p,k}$ qui peut être interprété comme le nombre de gouttes réelles représentées par la particule numérique k . D'après l'équation (3.21b), le poids numérique de chaque particule numérique est constant au cours du temps du fait que, dans le cas où on néglige les processus de fragmentation et de coalescence des gouttes, il n'y a pas de terme source au second membre de l'équation (3.18).

Remarque 4

Lors de l'exposé de la méthodologie de couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray (voir chapitre §6), nous verrons que l'introduction de termes sources permettant le transfert de la masse liquide entre les deux modèles se traduit dans le modèle de spray par l'ajout d'un terme source au second membre de l'équation (3.21). Dans ce cas, les poids des particules numériques ne seront plus constants au cours du temps et l'équation (3.21b) sera modifiée.

3.2.1.2 Équations de transport des particules numériques

En appliquant la formulation générale du système d'équations lagrangiennes (3.21) au cas de l'équation (3.2), on obtient le système suivant :

$$\forall k \in \llbracket 1, \mathcal{N}_p \rrbracket, \quad \begin{cases} \frac{d}{dt}(\mathbf{x}_{p,k}) = \mathbf{v}_{p,k} & (3.22a) \\ \frac{d}{dt}(\mathbf{v}_{p,k}) = \frac{(\mathbf{v}_{f@p,k} - \mathbf{v}_{p,k})}{\tau_{p,k}} + g & (3.22b) \\ w_{p,k}(t) = w_{p,k}(0) & (3.22c) \end{cases}$$

où \mathcal{N}_p est le nombre de particules numériques.

3.2.1.3 Terme de couplage avec le fluide porteur

Le terme source $\mathbf{s}_{trainée}$, qui intervient dans les équations du fluide porteur (3.16), a été défini par (3.17) dans sa formulation continue. Dans le cadre de la méthode particulaire, celui-ci est reformulé sous la forme :

$$\mathbf{s}_{trainée} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} -w_p(t) \mathbf{F}_{p,t} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,k}(t)) \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

3.2.2 Discrétisation temporelle

Pour pouvoir calculer numériquement l'évolution des particules numériques à partir du système d'équations (3.22), il est nécessaire de procéder au préalable à sa discrétisation temporelle.

Les équations du mouvement des particules numériques (3.22) et les équations du fluide porteur (3.16) forment un système global d'équations couplées. Afin de simplifier la résolution numérique du système global, on effectue la discrétisation de ce système avec une méthode

de pas fractionnaires. Cette méthode consiste à scinder le système global en plusieurs sous-systèmes et à effectuer la résolution numérique de chaque sous-système par étapes successives.

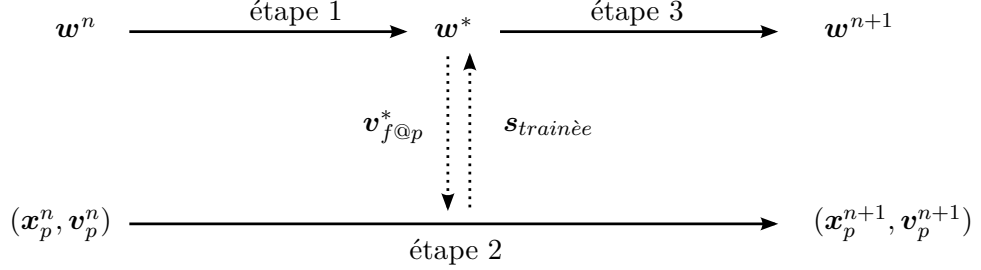


FIGURE 3.1 – Algorithme à pas fractionnaires pour la discrétisation temporelle du spray couplée au fluide porteur

On note respectivement $\mathbf{x}_p|_k^n$ et $\mathbf{v}_p|_k^n$ la position et la vitesse de la particule numérique k calculées à l'instant t^n . L'algorithme à pas fractionnaires permettant de calculer les grandeurs liées aux particules numériques et au fluide porteur à l'instant t^{n+1} est alors composé de trois étapes schématisées sur la Figure 3.1. On décrit ces trois étapes ci-après :

- ▷ **Étape 1** : Résolution des équations de l'écoulement porteur (sans $\mathbf{s}_{trainée}$).
On résout le système suivant :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{H} = \nabla \cdot (\mathcal{C} + \mathcal{V}) + \mathbf{s}_g \quad (3.24)$$

Ce système est le système d'équations du modèle bifluide (2.36) présenté dans le chapitre §2. La discrétisation et la méthode de résolution sont décrites à la section §2.2. À la fin de cette étape, les grandeurs primitives de l'écoulement porteur sont notées \mathbf{u}^* et les variables conservatives \mathbf{w}^* .

- ▷ **Étape 2** : Résolution des équations de transport des particules.
On résout le système (3.22) avec un schéma de discrétisation temporelle semi-analytique [69] :

$$\forall k \in \llbracket 1, \mathcal{N}_p \rrbracket, \quad \begin{cases} \mathbf{x}_p|_k^{n+1} = \mathbf{x}_p|_k^n + \frac{\Delta t^n}{2} (\mathbf{v}_p|_k^n + \mathbf{v}_p|_k^{n+1}) & (3.25a) \\ \mathbf{v}_p|_k^{n+1} = \theta \mathbf{v}_p|_k^n + (1 - \theta) \mathbf{v}_{f@p}|_k^* + \Delta t^n \mathbf{g} & (3.25b) \\ w_{p,k}^{n+1} = w_{p,k}^n & (3.25c) \end{cases}$$

où $\theta = \exp(-\Delta t^n / \tau_p|_k^n)$ et $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$.

Dans l'équation discrète (3.25b), le terme $\mathbf{v}_{f@p}|_k^*$ désigne la valeur de la vitesse du fluide porteur à l'étape 1 interpolée à la position $\mathbf{x}_p|_k^n$ de la particule numérique k . La méthode d'interpolation de la vitesse est décrite dans le paragraphe §3.2.3.

- ▷ **Étape 3** : Influence de la traînée des particules sur l'écoulement porteur.
On résout :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \mathbf{s}_{trainée} \quad (3.26)$$

où $\mathbf{s}_{trainée}$ est défini par (3.23). Ce système est discrétisé sous la forme suivante :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad \begin{cases} \tilde{\rho}_l|_i^{n+1} = \tilde{\rho}_l|_i^* & (3.27a) \\ \tilde{\rho}_g|_i^{n+1} = \tilde{\rho}_g|_i^* & (3.27b) \\ (\rho \mathbf{v})|_i^{n+1} = (\rho \mathbf{v})|_i^* + \Delta t^n \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} \mathbf{s}_{t,k \rightarrow i} & (3.27c) \end{cases}$$

Dans l'équation (3.27c), $\mathbf{s}_{t,k \rightarrow i}$ désigne le terme source discret lié à la particule numérique k dans la cellule Ω_i . Le terme source $\mathbf{s}_{t,k \rightarrow i}$ est défini par :

$$\mathbf{s}_{t,k \rightarrow i} = -\phi_{k \rightarrow i} w_{p,k}^{n+1} m_p \left(\frac{\mathbf{v}_p|_k^{n+1} - \mathbf{v}_p|_k^n}{\Delta t^n} - \mathbf{g} \right) \quad (3.28)$$

où $\phi_{k \rightarrow i}$ est la valeur du poids de la projection de la particule numérique k dans la cellule Ω_i . Elle est définie par :

$$\phi_{k \rightarrow i} = \begin{cases} \frac{1}{|\Omega_i|} & \text{si } \mathbf{x}_p|_k^{n+1} \in \Omega_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.29)$$

La définition (3.29) de $\phi_{k \rightarrow i}$ n'est autre qu'une approximation par une fonction constante par morceaux de la mesure discrète $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p|_k^{n+1})$ intervenant dans l'expression (3.23) du terme source $\mathbf{s}_{trainée}$.

Il serait également possible de définir une fonction de projection ϕ qui permettrait de distribuer les termes sources liés aux particules numériques sur plusieurs cellules situées dans le voisinage d'une particule numérique [34, 88]. Ceci permettrait, entre autre, d'améliorer la robustesse et la précision de la méthode grâce à une fonction de projection plus "lisse". Toutefois cela compliquerait grandement la programmation, en particulier, dans le cas où on utilise une méthode de décomposition de domaine pour la parallélisation du code sur des supercalculateurs à mémoire distribuée.

3.2.3 Interpolation des propriétés du fluide porteur.

Pour calculer les termes de couplage entre une particule numérique et le fluide porteur, il est nécessaire d'évaluer les propriétés du fluide porteur à la position de la particule. Pour cela, on doit définir une méthode d'interpolation qui permette de calculer la valeur d'un champ eulérien du fluide porteur à la position de la particule numérique. Différentes méthodes d'interpolations peuvent être utilisées (voir par exemple [34]).

Dans le cadre de ces travaux, une méthode d'interpolation basée sur un développement en série de Taylor à l'ordre 1 a été retenue. Ainsi, pour une particule numérique k située à la position $\mathbf{x}_{p,k}$ dans la cellule Ω_i du maillage, les propriétés \mathbf{u} du fluide porteur sont calculées en $\mathbf{x}_{p,k}$ grâce à la formule d'interpolation suivante :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_{p,k}) = \mathbf{u}_i + \nabla \mathbf{u}_i \cdot (\mathbf{x}_{p,k} - \mathbf{G}_i) \quad (3.30)$$

où $\nabla \mathbf{u}_i$ est le gradient discret de \mathbf{u} calculé dans la cellule Ω_i en utilisant la méthode des moindres carrés décrite au paragraphe §2.2.2.3.

On peut noter qu'un des avantages de cette méthode d'interpolation est qu'elle ne nécessite que très peu de développements supplémentaires : les fonctions de calcul des gradients discrets dans les cellules, développées dans le cadre de la méthode MUSCL (cf. §2.2.8), peuvent être réutilisées.

3.2.4 Conditions aux limites pour les particules numériques

Jusqu'à présent la méthode particulière a été présentée sous l'hypothèse d'un espace des phases illimité égal à $\mathbb{R}^3_{\mathbf{x}_p} \times \mathbb{R}^3_{\mathbf{v}_p} \times \mathbb{R}^+_{r_p}$. En pratique les particules numériques évoluent dans un domaine physique dont les frontières sont définies par le maillage, on a alors $\mathcal{E} = \Omega_{\mathbf{x}_p} \times \mathbb{R}^3_{\mathbf{v}_p} \times \mathbb{R}^+_{r_p}$ et il faut donc gérer des conditions aux limites pour le spray.

À chaque frontière du domaine de calcul, on associe un type de conditions aux limites sélectionné parmi la liste suivante :

- ▷ *sortie* : une particule traversant une frontière de type *sortie* est supprimée.
- ▷ *périodicité* : une particule traversant une frontière de type *périodicité* est aussitôt réinjectée au point image.
- ▷ *rebond élastique sur paroi* : une particule atteignant une frontière de ce type subit une collision élastique. La vitesse \mathbf{v}'_p de la particule après le rebond vérifie la relation suivante :

$$\mathbf{v}'_p = \mathbf{v}_p - 2(\mathbf{v}_p \cdot \mathbf{n}_{paroi})\mathbf{n}_{paroi} \quad (3.31)$$

où \mathbf{v}_p est la vitesse incidente de la particule avant le rebond et \mathbf{n}_{paroi} est la normale à la surface de la paroi.

Les conditions aux limites décrites ci-dessus sont relativement simples mais elles couvrent l'essentiel des besoins recensés pour les applications visées. De plus, on peut noter que la condition de type *rebond* est volontairement basée sur des hypothèses très simplificatrices qui conduisent, à ce stade, à ne pas considérer les différents régimes d'impact d'une goutte sur une paroi et à ne pas prendre en compte les pertes d'énergie cinétique dues à une collision inélastique. Toutefois, dans le chapitre §6 concernant le couplage du modèle bifluide et du modèle de spray, le cas où les gouttes se déposent sur la paroi impactée sera considéré.

3.2.5 Conditions d'injection des particules numériques

Pour injecter des particules numériques dans le domaine de calcul, il est nécessaire de définir la liste des points d'injection et pour chaque point de fixer :

- ▷ Le nombre de particules numériques injectées par unité de temps,
- ▷ Leur vitesse,
- ▷ Leur diamètre.

En pratique, ceci est réalisé en définissant des injecteurs numériques de particules. À chaque injecteur numérique, on associe un volume d'injection \mathcal{V}_{inj} , un débit massique de gouttes à injecter $\dot{m}_{p,inj}$, et une liste de paramètres définissant les caractéristiques des particules numériques à injecter : la masse numérique $m_p^{(num)}$ de chaque particule numérique, la vitesse d'injection des gouttes et la taille des gouttes. À partir de ces paramètres, on détaille dans la suite du paragraphe comment est réalisée l'injection des particules numériques.

Point d'injection. Le point d'injection de chaque particule numérique est déterminé en tirant aléatoirement une position dans le volume d'injection \mathcal{V}_{inj} d'un injecteur numérique². Pour ce tirage, la loi de probabilité dans le volume d'injection est supposée uniforme. Pour chaque injecteur numérique, une liste des cellules du maillage incluses dans le volume d'injection est créée au début du calcul. Ceci permet de trouver rapidement la cellule dans laquelle est injectée initialement une particule numérique en ne parcourant que les cellules recensées dans la liste.

2. Actuellement, le volume \mathcal{V}_{inj} peut être délimité par une sphère (un cercle, en 2D) ou par un pavé (un rectangle, en 2D)

Nombre de particules numériques injectées. Pour chaque volume d'injection, le nombre de particules numériques injectées $\mathcal{N}_{p,inj}^n$ au cours d'un pas de temps Δt^n est calculé à partir de la valeur du débit massique de gouttes $\dot{m}_{p,inj}$ et de la valeur de la masse de liquide représentée par chaque particule numérique $m_p^{(num)}$ (avec $\forall k \in \llbracket 1, \mathcal{N}_p \rrbracket$, $w_{p,k} m_{p,k} = m_p^{(num)}$). Le nombre $\mathcal{N}_{p,inj}^n$ est alors défini par :

$$\mathcal{N}_{p,inj}^n = \left\lfloor \frac{\Delta t^n \dot{m}_{p,inj}}{m_p^{(num)}} \right\rfloor \quad (3.32)$$

où on note $\lfloor x \rfloor$ la partie entière de x .

Comme $\mathcal{N}_{p,inj}^n$ est obligatoirement un nombre entier et comme $m_p^{(num)}$ est un paramètre fixé, il est possible d'après la formule (3.32) qu'une masse résiduelle ne soit pas injectée au cours du pas de temps Δt^n . L'injection de cette masse résiduelle, qui est égale à $(\Delta t^n \dot{m}_{p,inj} - \mathcal{N}_{p,inj}^n m_p^{(num)})$, est alors reportée au pas de temps suivant.

Vitesse d'injection. La vitesse d'injection des particules numériques est une donnée d'entrée que l'utilisateur doit fournir. La vitesse d'injection peut être définie comme la somme d'une vitesse moyenne (qui est commune à toutes les particules) et d'une vitesse fluctuante (qui est déterminée de façon aléatoire pour chaque particule numérique injectée).

Taille des gouttes. La taille des gouttes injectées est décrite à partir de lois de distribution du diamètre des gouttes formulées en masse. Les lois de distribution couramment utilisées sont par exemple des lois discrètes (de la forme $P(d_p) = \delta_{d_p-d_0}$ avec d_0 est le diamètre à imposer) dans le cas monodisperse, et des lois de Rosin-Rammler ou log-normales dans le cas polydisperse. Selon la loi de distribution choisie, il est nécessaire de préciser différents paramètres comme le diamètre moyen ou la variance.

Le diamètre d_p de chaque particule numérique est déterminé au moment de l'injection en effectuant un tirage selon la loi de distribution choisie. Connaissant le diamètre $d_{p,k}$ de la particule numérique k et la masse totale de liquide $m_p^{(num)}$ qu'elle représente, on peut alors déterminer son poids numérique $w_{p,k}$ à partir de la formule suivante :

$$w_{p,k} = \frac{m_p^{(num)}}{\rho_{p,k} \frac{\pi d_{p,k}^3}{6}} = \frac{m_p^{(num)}}{m_{p,k}} \quad (3.33)$$

3.3 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté le modèle de spray développé pour la simulation du brouillard de gouttes issues de la fragmentation primaire d'une nappe liquide. La modélisation s'appuie sur plusieurs hypothèses simplificatrices mais qui ne remettent pas en cause la généralité de l'approche.

Étant donné le nombre important de gouttes produites au cours du processus d'atomisation, le modèle retenu est basé sur une approche statistique décrivant l'évolution du spray grâce à une équation cinétique dont l'inconnue est la densité moyenne de gouttes dans l'espace des phases. La résolution de cette équation est effectuée par une méthode particulière (dite aussi méthode lagrangienne).

Chapitre 4

Développements réalisés dans le code SLOSH

Sommaire

4.1	Liste des principaux développements	83
4.2	Le calcul massivement parallèle	84
4.2.1	Description de l'architecture des super-calculateurs ciblés.	85
4.2.2	Le standard MPI en quelques mots	85
4.2.2.1	Principe général	86
4.2.2.2	Les communications point-à-point	86
4.2.2.3	Les communications collectives	87
4.2.3	Évaluation des performances d'un programme parallèle	88
4.3	Parallélisation du code SLOSH en utilisant une méthode de dé-	
	composition de domaine	89
4.3.1	La méthode de décomposition de domaine	89
4.3.2	Mise en œuvre dans le code SLOSH	90
4.3.2.1	Partitionnement du maillage	90
4.3.2.2	Recouvrement des communications	91
4.3.2.3	Parallélisation de l'algorithme BICGSTAB	91
4.3.2.4	Gestion des écritures des fichiers de sortie	94
4.3.2.5	Parallélisation du module lagrangien	95
4.3.3	Évaluation des performances du code SLOSH	95
4.4	Conclusion du chapitre	96

L'ensemble des développements numériques de cette étude a été effectué au sein du code SLOSH de l'ONERA. Dans ce chapitre, nous présentons les principales caractéristiques de ce code, puis nous décrivons les différentes étapes de développement qui ont été réalisées, au cours de la thèse, dans le but de mettre en place la méthodologie de couplage multi-échelle au sein de cet outil. En particulier, la parallélisation complète du code SLOSH a été une étape essentielle afin de pouvoir effectuer des simulations du processus d'atomisation dans des configurations réalistes avec des temps de calcul raisonnables. On présente donc les choix et la méthode qui ont permis d'effectuer celle-ci.

4.1 Liste des principaux développements

Le code SLOSH est un code de calcul développé depuis une dizaine d'années au Département Modèles pour l'Aérodynamique et l'Énergétique (DMAE) de l'ONERA par l'équipe

de P. Villedieu à travers deux thèses [15, 79], un post-doctorat [40] et différentes études financées par le CNES [80, 81, 41] et le CEA. Il a été développé, à l'origine, pour simuler le ballottement d'un liquide (*sloshing*, en anglais) dans un réservoir de véhicule spatial ou de satellite [15]. D'autres problématiques ont également été traitées à l'aide de cet outil comme, par exemple, la simulation d'impact de vagues sur un mur [72, 71] et la simulation d'un film liquide mince soumis à un cisaillement aérodynamique [13]. Ce code est avant tout un outil de recherche essentiellement développé au cours d'études exploratoires pour tester de nouveaux modèles et de nouvelles méthodes numériques. Celui-ci est basé sur le modèle à deux fluides compressibles non-miscibles présenté au chapitre §2. La résolution des équations du modèle est effectuée par une méthode de type volumes-finis opérant sur des maillages non-structurés, comme cela est décrit dans la section §2.2.

Afin de pouvoir développer notre méthodologie de couplage pour la simulation multi-échelle de l'atomisation d'une nappe liquide avec le code SLOSH, plusieurs améliorations et extensions y ont été apportées au cours de cette thèse. Parmi celles-ci, on peut citer :

- ▷ L'extension aux maillages 3D polyédriques non-structurés et la réécriture des routines de gestion du maillage. Initialement, le code était limité aux maillages 3D obtenus par extrusion de maillages 2D (hypothèse de maillage structuré selon la troisième dimension). Cette extension a permis de lever cette limitation.
- ▷ L'implémentation de la méthode des moindres carrés utilisée pour le calcul des gradients dans les cellules, sur les faces et pour effectuer les interpolations aux sommets (cf. §2.2.2).
- ▷ Le développement et l'implémentation d'un limiteur compressif pour la capture d'interface (cf. §2.2.8.2).
- ▷ Le développement d'un module de transport de particules lagrangiennes pour la résolution numérique du modèle de spray (cf. chapitre §3).
- ▷ La parallélisation complète du code pour le calcul massivement parallèle.

Dans la suite de ce chapitre, après avoir rappelé les enjeux du calcul massivement parallèle, nous présentons les choix et la méthode retenus pour réaliser la parallélisation du code SLOSH. Ensuite, nous détaillons les étapes de développement du module de transport de particules lagrangiennes.

4.2 Le calcul massivement parallèle

La simulation de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée implique l'utilisation de maillages adaptés à la capture des échelles des phénomènes à l'origine de la création du spray. Ceux-ci sont par conséquent constitués de plusieurs millions de cellules pour discrétiser l'ensemble du domaine physique. La résolution des équations du modèle bifluide sur de tels maillages est alors un problème qui nécessite une puissance de calcul très importante si on souhaite avoir des temps de restitution raisonnables (c'est-à-dire de l'ordre d'une journée à deux semaines pour les plus gros calculs). De plus, les ressources en mémoire nécessaires au stockage de l'ensemble des variables utilisées lors de la résolution numérique du problème sont souvent supérieures à la capacité mémoire d'une station de travail classique.

Dans ce contexte, l'utilisation de la puissance de calcul fournie par des super-calculateurs massivement parallèles s'avère incontournable. Cependant, au démarrage de la thèse, SLOSH était un code séquentiel écrit en langage Fortran 90 qui ne permettait pas d'exploiter les architectures parallèles. Il a donc été nécessaire de paralléliser le code SLOSH. Afin de justifier le choix de la méthode de parallélisation, nous présentons brièvement l'architecture des super-calculateurs sur lesquels nous souhaitons utiliser le code. Puis, nous présentons le standard

MPI qui a été utilisé pour le développement de la version parallèle de SLOSH.

4.2.1 Description de l'architecture des super-calculateurs ciblés.

La plupart des super-calculateurs actuellement dans le classement du TOP500 (<http://www.top500.org/>) sont basés sur des architectures à mémoire distribuée, au détriment des architectures à mémoire partagée qui s'avèrent plus coûteuses et limitées en terme d'extensibilité.

L'architecture à mémoire distribuée consiste à associer un espace mémoire (mémoire RAM) à chaque processeur et connecter les processeurs entre eux à travers un réseau d'interconnexion (cf. Figure 4.1). Chaque processeur peut alors accéder uniquement à la mémoire qui lui est associée. Par exemple, si un processeur P_1 a besoin d'accéder à une donnée qui réside dans la mémoire M_2 associée au processeur P_2 , il est alors nécessaire d'effectuer explicitement un échange de messages à travers le réseau d'interconnexion pour envoyer les données depuis la mémoire M_2 vers le processeur P_1 . L'échange de messages est le plus souvent effectué en utilisant une librairie implémentant le standard MPI (Message Passing Interface).

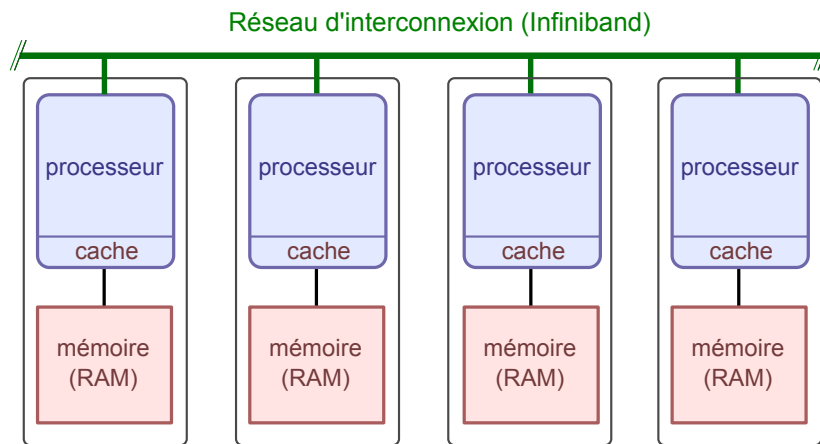


FIGURE 4.1 – Schéma de principe de l'architecture d'un calculateur à mémoire distribuée.

En réalité, les super-calculateurs actuels sont basés sur des architectures beaucoup plus complexes que celle schématisée sur la Figure 4.1. En effet, on rencontre le plus souvent des architectures hybrides (cf. Figure 4.2) qui utilisent à la fois une architecture à mémoire partagée au sein de nœuds de calcul (*SMP nodes*) et une architecture à mémoire distribuée entre les nœuds de calcul. Chaque nœud de calcul est composé de plusieurs processeurs multi-cœurs, où chaque cœur a la capacité d'exécuter un processus de façon autonome. Pour améliorer les performances, ces architectures hybrides permettent d'exploiter des méthodes de parallélisation hybrides qui combinent le parallélisme à mémoire partagée (par exemple, en utilisant, par exemple OpenMP [23]) au sein d'un nœud de calcul et le parallélisme à mémoire distribuée entre les nœuds de calcul (en utilisant MPI). Toutefois, pour exploiter pleinement les gains de performance du parallélisme hybride en adaptant un code déjà existant, il est souvent nécessaire d'effectuer un travail conséquent de restructuration du code. Pour cette raison, la parallélisation du code SLOSH a été faite en exploitant uniquement le parallélisme à mémoire distribuée en utilisant la norme MPI.

4.2.2 Le standard MPI en quelques mots

Le standard MPI (Message-Passing Interface) est un ensemble de spécifications définissant des protocoles de communication par passage de messages. Ce standard a été conçu

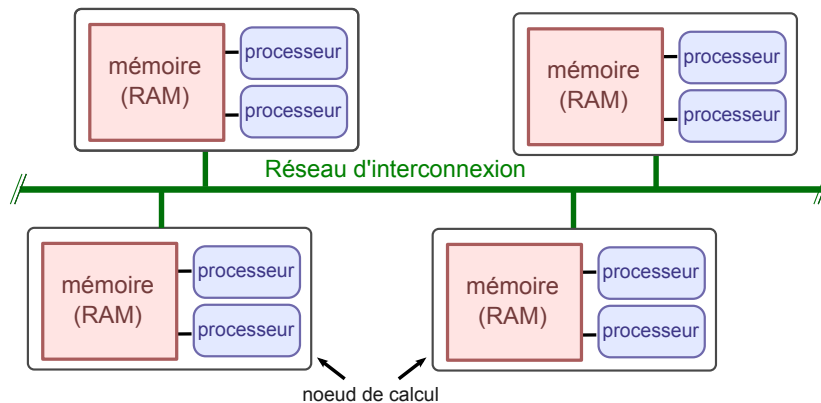


FIGURE 4.2 – Représentation schématique de l’architecture hybride d’un ordinateur à mémoire distribuée, constitué de nœuds de calcul à mémoire partagée.

pour pouvoir exploiter pleinement les architectures à mémoire distribuée, tout en restant compatible avec les architectures à mémoire partagée. Plusieurs révisions du standard ont été publiées depuis sa version initiale datant de 1994. Pour nos développements, nous avons utilisé la version MPI 2.2. Pour cette version, les bibliothèques implémentant le standard MPI sont disponibles pour les langages Fortran, C et C++.

Dans la suite, nous présentons brièvement les concepts du standard MPI qui ont été utilisés pour la parallélisation du code SLOSH. Le lecteur souhaitant un complément d’information sur les spécificités du standard MPI 2.2 peut se référer à [1].

4.2.2.1 Principe général

Le principe général de l’utilisation du standard MPI est présenté dans le cas du paradigme SPMD (*Single Program, Multiple Data*). Le paradigme SPMD consiste à faire exécuter le même programme (ici, le code SLOSH) par un ensemble de processus, où chaque processus opère sur les données privées qu’il possède localement en mémoire.

L’échange de données entre deux processus se fait par l’envoi d’un message. Le message contient alors l’ensemble des données à transmettre et des informations permettant de décrire la nature du message (type de données, tailles, ...) pour que le processus récepteur puisse interpréter les données du message reçu.

Pour établir une communication par message entre deux processus, il est nécessaire que les deux processus appartiennent à un même *communicateur* (pour simplifier, nous ne considérons pas le cas des inter-communicateurs). Le communicateur par défaut, nommé *MPI_COMM_WORLD*, contient tous les processus actifs. Dans un communicateur, chaque processus est identifié de façon unique par son *rang*, ce qui permet de désigner le(s) processus émetteur(s) et le(s) processus récepteur(s) lorsqu’on souhaite établir une communication au sein du communicateur. Le standard MPI définit deux types de communications : les communications point-à-point et les communications collectives. Leurs spécificités sont décrites dans les deux paragraphes suivants.

4.2.2.2 Les communications point-à-point

Les communications point-à-point ont lieu entre seulement deux processus d’un communicateur. Le processus qui envoie les données est le processus émetteur et celui qui les reçoit est le processus récepteur. Le processus émetteur doit invoquer une fonction d’envoi (par exemple, *MPI_SEND*) et le processus récepteur doit invoquer une fonction de réception (par

exemple, `MPI_RECV`). Les autres processus du communicateur n'interviennent pas dans la communication.

Différents modes d'envoi et de réception sont prévus par le standard MPI (cf. [Tableau 4.1](#)). Pour la description détaillée de chaque mode, on renvoie le lecteur à [1]. Toutefois, il est important de noter qu'il existe deux catégories de communications point-à-point :

- *les communications bloquantes*, qui interrompent le fil d'exécution du programme sur les processus prenant part à la communication et ce pendant toute la durée de l'action de communication. Pour les processus mis en jeu, l'espace mémoire stockant les données à émettre/recevoir est alors immédiatement accessible à la sortie de la fonction d'envoi/de réception.
- *les communications non-bloquantes*, qui n'interrompent pas le fil d'exécution du programme par le processus prenant part à la communication pendant la durée de la communication. À la fin de l'appel de la fonction d'envoi/réception, la communication est amorcée mais n'est pas forcément terminée. Avant de modifier l'espace mémoire d'où proviennent les données envoyées ou d'accéder à l'espace mémoire où doivent être écrites les données reçues, il est donc impératif de s'assurer que la communication est achevée en appelant une des fonctions MPI prévues à cet effet (par exemple, en utilisant `MPI_WAIT`).

Mode	Bloquant	Non-bloquant
Envoi standard	<code>MPI_SEND</code>	<code>MPI_ISEND</code>
Envoi "ready"	<code>MPI_RSEND</code>	<code>MPI_IRSEND</code>
Envoi synchrone	<code>MPI_SSEND</code>	<code>MPI_ISSEND</code>
Envoi bufferisé	<code>MPI_BSEND</code>	<code>MPI_IBSEND</code>
Réception	<code>MPI_RECV</code>	<code>MPI_IRECV</code>

Tableau 4.1 – Liste des principaux modes de communication point-à-point.

L'utilisation des communications non-bloquantes permet dans certains cas de masquer le temps nécessaire à l'échange des messages en utilisant une méthode dite de *recouvrement*. Une méthode de recouvrement consiste à faire effectuer, pendant la durée de la communication, des calculs sur des données qui ne sont pas concernées par l'action de communication en cours (cf. [Figure 4.3](#)). Avec cette méthode, il est possible d'atteindre de très bonnes performances du point de vue de la parallélisation. Celle-ci a donc été mise en œuvre pour la parallélisation du code SLOSH.

4.2.2.3 Les communications collectives

Une communication dite *collective* est une communication qui concerne tous les processus d'un communicateur. Une fonction de ce type permet donc d'effectuer des échanges de données entre tous les processus actifs dans le cas où le communicateur `MPI_COMM_WORLD` est passé en argument. Par construction, toutes les fonctions collectives sont définies comme bloquantes¹ et elles doivent être appelées par tous les processus du communicateur. Une description complète de toutes les fonctions collectives est donnée dans [1]. Ici, nous présentons uniquement les fonctions qui ont été les plus utilisées :

- ▷ `MPI_BARRIER` : Cette fonction est une barrière globale qui permet la synchronisation de tous les processus d'un communicateur. Cette fonction est utile pour garantir que tous les processus aient exécuté le programme jusqu'à une certaine étape.

1. Depuis la version 3 de la norme MPI, les communications collectives peuvent être non-bloquantes.

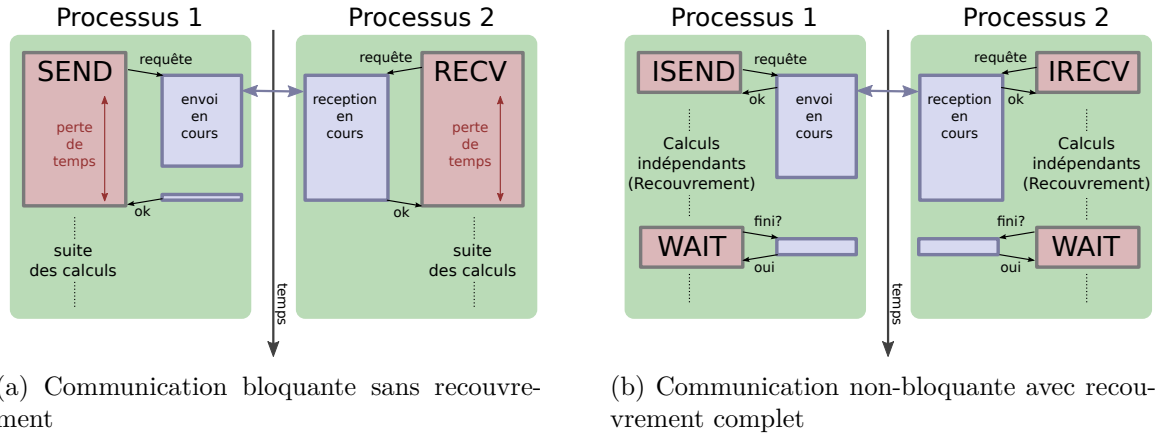


FIGURE 4.3 – Principe de la méthode de recouvrement des communications MPI par des calculs.

- ▷ *MPI_BCAST* : Cette fonction permet la diffusion globale de données depuis un processus émetteur vers l'ensemble des processus du communicateur.
- ▷ *MPI_(ALL)REDUCE* : Cette fonction permet d'effectuer une opération de réduction globale. Cela consiste à collecter, sur un processus, les données en provenance de tous les processus et à appliquer une opération sur ces données (somme, minimum, maximum, ...). Pour la variante *MPI_ALLREDUCE*, il s'agit d'une réduction globale suivie d'un *MPI_BCAST* qui permet de diffuser le résultat de la réduction à l'ensemble des processus du communicateur.

4.2.3 Évaluation des performances d'un programme parallèle

Lors de l'exécution d'un programme sur une machine parallèle, une partie du temps d'exécution est imputable au surcoût induit par les tâches nécessaires à la parallélisation. Dans le cas d'une parallélisation de type SPMD sur une machine à mémoire distribuée, le coût supplémentaire est essentiellement dû aux échanges de messages, aux étapes de synchronisation entre les processus et à la duplication de certaines données. Ci-après, nous présentons les différentes mesures généralement employées pour évaluer les performances d'un programme parallèle.

Accélération et efficacité

Les performances et la qualité de la parallélisation sont généralement mesurées en calculant l'accélération $A(N)$ (auss appelée *speed-up*) et l'efficacité $E(N)$. Pour une charge donnée, si on note T_1 le temps d'exécution sur 1 cœur et T_N le temps d'exécution sur N cœurs², l'accélération et l'efficacité sont alors définies par :

$$A(N) = \frac{T_1}{T_N} \quad (4.1)$$

$$E(N) = \frac{T_1}{N T_N} = \frac{A(N)}{N} \quad (4.2)$$

Dans le cas idéal, c'est-à-dire sans surcoût lié à la parallélisation, on a : $A(N) = N$ et $E(N) = 1$. Dans le cas général, on a : $A(N) < N$ et $E(N) < 1$.

2. Dans la suite, on se place toujours dans le cas où on affecte un processus MPI à chaque cœur de calcul.

Passage à l'échelle

Le *passage à l'échelle*, aussi appelé la *scalabilité*, d'un programme parallèle est une mesure qui permet d'évaluer la capacité d'un code parallèle à exploiter des puissances de calcul de plus en plus importantes. Concrètement, cette mesure permet d'évaluer le comportement d'un programme parallèle lorsqu'on augmente le nombre de cœurs de calcul. On distingue deux types de scalabilité obtenues dans deux contextes différents :

- ▷ *scalabilité faible* : on augmente le nombre de cœurs et on augmente la quantité de données à traiter, de sorte que la quantité de données à traiter par cœur soit constante. Dans le cas d'une scalabilité faible idéale, on doit obtenir un temps d'exécution du programme constant. Ceci correspond à une efficacité constante qui est donc indépendante du nombre de cœurs de calcul.
- ▷ *scalabilité forte* : on augmente le nombre de cœurs en conservant la même quantité de données à traiter. De le cas idéal, on doit obtenir une efficacité constante et la diminution du temps d'exécution doit être inversement proportionnel à l'augmentation du nombre de cœurs. Dans le cas réel, l'efficacité diminue avec le nombre de cœurs. En pratique, cette mesure permet d'évaluer la charge optimale par cœurs permettant d'exploiter au mieux les ressources de calcul.

4.3 Parallélisation du code SLOSH en utilisant une méthode de décomposition de domaine

4.3.1 La méthode de décomposition de domaine

Les méthodes de décomposition de domaine (aussi appelées méthodes de parallélisme de données) sont souvent choisies pour effectuer la parallélisation des méthodes numériques permettant de résoudre des équations aux dérivées partielles sur un maillage. Celles-ci reposent sur le principe de "diviser pour régner" qui est bien adapté à une programmation parallèle de type SPMD.

En pratique, la méthode de décomposition de domaine consiste à diviser le maillage du domaine complet en sous-domaines et de distribuer les sous-domaines entre les processus MPI. Chaque processus doit alors effectuer les tâches du programme uniquement pour le sous-domaine qui lui est assigné. Le couplage entre les sous-domaines est assuré en échangeant les données aux frontières des sous-domaines entre les processus dont les sous-domaines sont adjacents.

Le *partitionnement* consiste à équilibrer la charge de travail entre les processus MPI. Si chaque cellule du maillage représente une charge de travail identique, ceci revient à équilibrer le nombre de cellules entre les sous-domaines. L'équilibrage des charges entre les sous-domaines a une influence importante sur les performances de la parallélisation : le temps total d'exécution du programme dépend directement du temps mis par le processus le plus lent, c'est-à-dire le processus qui a le plus de données à traiter. L'autre objectif du partitionnement est de minimiser l'aire des surfaces d'échanges aux frontières entre les deux sous-domaines adjacents. Le but est de réduire le volume de données qui doivent être échangées entre les processus afin de diminuer les temps de communication. Plus le ratio entre le volume des sous-domaines et l'aire des surfaces d'échanges est important, plus la parallélisation est efficace.

4.3.2 Mise en œuvre dans le code SLOSH

Ce paragraphe décrit les principales étapes qui ont été nécessaires à la parallélisation du code SLOSH en combinant l'utilisation d'une méthode de décomposition de domaine (cf. §4.3.1) et l'utilisation des protocoles d'échanges de messages MPI (cf. §4.2.2).

4.3.2.1 Partitionnement du maillage

Le partitionnement du maillage est effectué en utilisant la bibliothèque PT-Scotch [17] (qui est la version parallèle de Scotch). Cette bibliothèque permet, entre autre, de partitionner un maillage à partir du graphe associé à ce maillage.

Construction du graphe. Un graphe est constitué de sommets et d'arêtes. Pour le schéma volumes-finis centré aux cellules du code SLOSH, il est naturel d'associer les sommets du graphe aux cellules du maillage. En ce qui concerne les arêtes du graphe, comme la molécule de calcul des schémas numériques associée à une cellule s'étend jusqu'au voisinage de sommets de cette cellule, on considère qu'un sommet S_i du graphe est relié à un sommet S_j par une arête \tilde{a}_{ij} si et seulement si la cellule Ω_i associée au sommet S_i est dans le voisinage par les sommets $\mathcal{V}_s(j)$ de la cellule Ω_j associée au sommet S_j . Afin d'obtenir un partitionnement optimal, les conditions limites de périodicité sont aussi prises en compte lors de la construction du graphe en créant les arêtes correspondantes aux connectivités sous-jacentes.

Actuellement, le graphe peut être construit en pré-traitement (lors de l'étape de conversion du fichier maillage au format SLOSH) ou être construit au début du programme SLOSH par le processus de rang 0 avant d'être redistribué entre les processus. Dans le cas d'une reprise d'un calcul avec le même maillage, il n'est pas nécessaire de régénérer le graphe puisque celui-ci a été sauvegardé au calcul précédent. Il suffit alors de le lire pour re-partitionner le maillage en sous-domaines, avec un nombre de sous-domaines éventuellement différent de celui utilisé lors du calcul précédent.

Détermination des sous-domaines. La bibliothèque PT-Scotch fournit comme résultat une carte de placement des cellules qui fait correspondre à chaque cellule du maillage global un identifiant correspondant à un numéro de sous-domaine. Après avoir associé un identifiant de sous-domaine à chaque processus³, un processus peut alors déduire la liste des cellules qui constituent le sous-domaine qui lui est attribué en lisant la carte de placement. La Figure 4.4 donne un exemple de partitionnement dans le cas où l'on souhaite diviser un maillage en deux sous-domaines pour effectuer les calculs en parallèle avec deux processus MPI. La frontière entre les deux sous-domaines est définie comme l'ensemble des faces communes à des cellules du sous-domaine 1 et à des cellules du sous-domaine 2. On définit également une cellule adjacente à une frontière comme étant une cellule dont au moins un des sommets appartient à une des faces constituant la frontière considérée.

La carte de placement est écrite dans un fichier après sa création. Dans le cas d'une reprise d'un calcul avec le même maillage et le même nombre de processus, il est alors possible de sauter les étapes de construction et de partitionnement du graphe en lisant directement le fichier où est stockée la carte de placement utilisée lors du calcul précédent.

3. Actuellement, le choix de l'attribution d'un sous-domaine à un processus de la machine parallèle ne fait l'objet d'aucune optimisation particulière car ce travail sort du cadre de cette thèse. Une optimisation possible consisterait à effectuer ce choix en minimisant la distance (physique) entre deux processus associés à des sous-domaines voisins afin de réduire les temps de communication.

Construction parallèle du maillage. Connaissant les cellules de son sous-domaine, chaque processus va pouvoir lire l'ensemble du "fichier maillage" en ne chargeant que les données nécessaires à la construction de la géométrie de son sous-domaine. En procédant ainsi on ne construit jamais la géométrie du maillage complet sur un unique processus, ce qui repousse les limitations potentielles dues à une utilisation de mémoire excessive sur l'un des processus.

Actuellement, le fichier maillage est écrit au format ASCII. Afin de pouvoir utiliser les fonctionnalités parallèles et optimisées de lecture de fichier qu'offre le standard MPI, une optimisation possible serait de passer le fichier maillage au format binaire. Le changement de format de stockage permettrait d'améliorer significativement les performances de cette étape. Ceci pourra donc être abordé dans des perspectives de développements futurs.

Construction de *cellules de garde*. Afin de synchroniser les sous-domaines, il est nécessaire d'échanger les données à la frontière entre deux sous-domaines voisins. Pour effectuer ces échanges, on adopte une méthode basée sur l'utilisation de *cellules de garde*. Pour chaque frontière de sous-domaine, des cellules de garde sont construites en dupliquant localement l'ensemble des cellules adjacentes des sous-domaines voisins. Une fois que les cellules de garde ont été construites au début du calcul, les valeurs des variables associées à ces cellules seront mises à jour au cours du calcul en échangeant des messages avec les processus voisins.

Sur la [Figure 4.5](#), les cellules de garde correspondant au partitionnement du maillage de la [Figure 4.4](#) sont représentées. Dans un sous-domaine, on distingue également deux catégories de cellule :

- ▷ *les cellules frontalières*, qui désignent l'ensemble des cellules d'un sous-domaine adjacentes à une frontière entre deux sous-domaines. Ces cellules correspondent aux cellules dont les valeurs associées devront être envoyées lors d'une synchronisation entre les sous-domaines.
- ▷ *les cellules intérieures*, qui désignent toutes les cellules d'un sous-domaine à l'exception des cellules frontalières. Ces cellules correspondent aux cellules qui ne sont pas affectées par la synchronisation entre les sous-domaines.

En introduisant ces deux catégories de cellule, nous allons voir au paragraphe suivant qu'il est alors possible de mettre en place une stratégie de recouvrement des communications par des calculs.

4.3.2.2 Recouvrement des communications

Le recouvrement des communications concerne exclusivement les communications point-à-point (cf. [§4.2.2.2](#)). Ces communications sont principalement utilisées pour effectuer les mises à jour des valeurs dans les cellules de garde de chaque sous-domaine. En pratique, une mise à jour des valeurs dans les cellules de garde est nécessaire à chaque fois qu'un processus effectue une boucle sur les cellules de son sous-domaine en modifiant leurs valeurs. Si on ordonnance les calculs sur les cellules d'un sous-domaine de sorte que les cellules frontalières soient traitées avant les cellules intérieures, il est alors possible de recouvrir l'envoi des nouvelles valeurs des cellules frontalières et la réception des cellules de garde par les calculs concernant les cellules intérieures. L'[algorithme 1](#) récapitule l'ensemble des étapes décrites précédemment.

4.3.2.3 Parallélisation de l'algorithme BICGSTAB

Dans le paragraphe [§2.2.9](#), la discrétisation partiellement implicite des équations de transport de la masse de chaque fluide du modèle bifluide nécessite de résoudre un système d'équa-

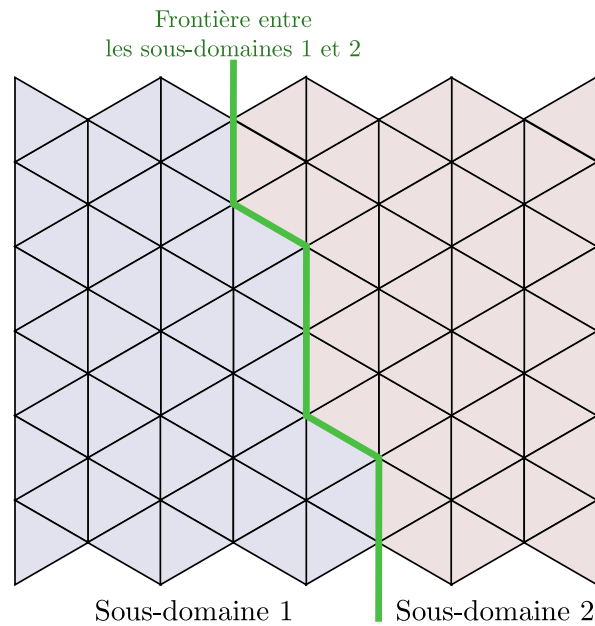


FIGURE 4.4 – Exemple de partitionnement d'un maillage en deux sous-domaines. Chaque sous-domaine est assigné à un processus MPI.

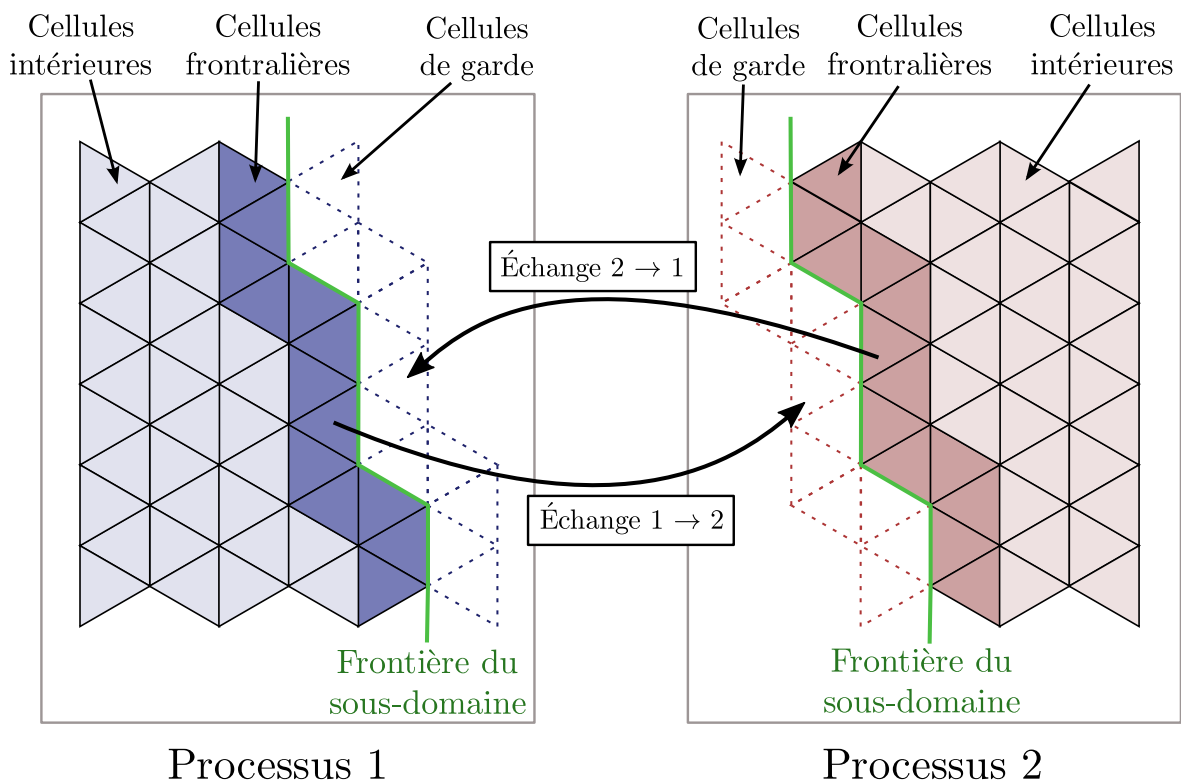


FIGURE 4.5 – Identification des différentes catégories de cellule dans le cas du partitionnement du maillage de la [Figure 4.4](#).

Entrées : Ensemble des valeurs de toutes les cellules du sous-domaine (y compris les cellules de garde) à l'étape n du calcul.

Sorties : Ensemble des valeurs de toutes les cellules du sous-domaine (y compris les cellules de garde) à l'étape $n + 1$ du calcul.

```

/* On calcule en premier sur les données à envoyer */
1 Pour chaque cellule frontalière faire
2   | Calculer la nouvelle valeur dans la cellule ;
3 Fin
/* On commence la synchronisation */
4 Débuter la réception non-bloquante des nouvelles valeurs des cellules de garde;
5 Débuter l'envoi non-bloquant des nouvelles valeurs des cellules frontalières;
/* On calcule les données indépendantes → recouvrement */
6 Pour chaque cellule intérieure faire
7   | Calculer la nouvelle valeur dans la cellule ;
8 Fin
/* On termine la synchronisation */
9 Attendre la fin de l'envoi des cellules frontalières ;
10 Attendre la fin de la réception des cellules de garde ;

```

Algorithme 1 : Algorithme décrivant la mise à jour en parallèle des variables attachées aux cellules avec recouvrement des communications

tions linéaires (2.161) de la forme $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ⁴, où \mathbf{A} est une matrice creuse et \mathbf{x} le vecteur des inconnues du système. Ce dernier est résolu numériquement par une méthode itérative appelée BICGSTAB [96]. L'algorithme 2 décrit les différentes étapes de calcul de cette méthode.

L'utilisation de l'algorithme BICGSTAB avec une méthode de décomposition de domaine implique que certaines opérations sont locales (si elles ne nécessitent pas d'échanges de données avec les domaines voisins) et d'autres globales (si elles nécessitent des communications).

Dans l'algorithme 2, nous avons distingué trois catégories d'opérations, pour lesquelles nous avons adapté la stratégie de parallélisation :

▷ *Les produits matrice-vecteur* (surlignés en rouge)

Pour cette catégorie d'opérations globales, il est nécessaire d'échanger au préalable les données des cellules de garde avant de pouvoir effectuer le produit matrice-vecteur correspondant au domaine local. Bien que ces échanges impliquent un volume important de données à transférer, nous avons limité leur impact sur les performances en utilisant la méthode de recouvrement d'écrite précédemment.

▷ *Les produits scalaires* (surlignés en vert)

Cette catégorie d'opérations est aussi globale. Elle se distingue toutefois de la précédente par le fait qu'elle nécessite une synchronisation entre tous les processus. En effet, pour calculer le produit scalaire global, il est nécessaire de calculer la somme de tous les produits scalaires locaux. Cette opération, bien qu'elle n'implique pas un volume important de données à échanger, peut très vite pénaliser les performances de la parallélisation à cause de la latence due à une synchronisation entre tous les processus.

▷ *Les combinaisons linéaires de vecteurs* (tout ce qui n'est pas surligné)

Cette catégorie d'opérations est locale et donc intrinsèquement parallèle. En pratique,

4. En réalité, on résout le système préconditionné suivant : $\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{b}}$ où $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}$, $\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$ et \mathbf{M} est la matrice du préconditionneur Bloc-Jacobi. La méthode de parallélisation reste identique dans ce cas.

chaque processus effectue les opérations sur ses données locales.

En adoptant une approche basée sur la parallélisation des différentes étapes de l'algorithme BICGSTAB en fonction des types d'opérations mis en jeu, nous avons pu développer un solveur parallèle performant et transparent vis-à-vis de la parallélisation. Cette dernière propriété est importante puisqu'elle assure que la décomposition de domaine ne va pas altérer le taux de convergence du solveur en fonction du nombre de domaines.

<p>Entrées : A, b, x_0, ϵ Sorties : x_n</p> <pre> 1 $r_0 = b - Ax_0$; 2 $\rho_0 = \alpha_0 = \omega_0 = 1$; 3 $v_0 = p_0 = 0$; 4 $b_0 = \max(\epsilon, \ b\)$; 5 Pour chaque $n = 1, 2, 3, \dots$ faire 6 $\rho_n = (r_0, r_{n-1})$; 7 $\beta = \frac{\rho_n}{\rho_{n-1} \omega_{n-1}}$; 8 $p_n = r_n + \beta(p_{n-1} - \omega_{n-1}v_{n-1})$; 9 $v_n = Ap_n$; 10 $\alpha = \frac{\rho_n}{(\rho_0, v_n)}$; 11 $s = r_{n-1} - \alpha v_n$; 12 $t = As_n$; 13 $\omega_n = \frac{(t, s)}{(t, t)}$; 14 $x_n = x_{n-1} + \alpha p_n + \omega_n s$; 15 $r_n = s_n - \omega_n t_n$; 16 Si $(\ r_n\ /b_0 < \epsilon)$ alors 17 STOP; 18 Fin 19 Fin </pre>

Algorithme 2 : Algorithme BICGSTAB, d'après [96], pour la résolution du système $Ax = b$ avec une précision ϵ .

4.3.2.4 Gestion des écritures des fichiers de sortie

La sauvegarde des résultats de calculs ou l'écriture des données permettant une reprise des calculs sont parmi les principales difficultés liées au calcul massivement parallèle. Ici, nous présentons les choix qui ont été effectués pour répondre à cette problématique.

Concernant l'écriture des fichiers de sortie, on distingue deux cas suivant la taille et la nature des fichiers :

- ▷ Pour les fichiers résultats, telles que les archives contenant les résultats d'évolution temporelle des variables de chaque cellule, le choix a été fait de créer un fichier ASCII par sous-domaine et par exécution du programme (dans le cas d'une reprise du calcul). Cela permet d'avoir un nombre raisonnable de fichiers de taille raisonnable. De plus,

l'étape de post-traitement peut être significativement accélérée car on a la possibilité de ne traiter que certains sous-domaines sur une période de temps choisie. L'inconvénient de ce choix est que les performances d'écriture peuvent être pénalisées sur certains calculateurs à cause de possibles congestions du système de gestion des fichiers si celui-ci n'arrive pas à gérer tous les fichiers accédés simultanément. Toutefois, la fréquence d'écriture est assez faible pour que le temps total d'écriture reste négligeable devant le temps total de calcul.

- ▷ Pour les fichiers dits de reprise, c'est-à-dire les fichiers où on stocke l'état des variables dans toutes les cellules afin de pouvoir reprendre le calcul, on a choisi d'écrire toutes les données de façon centralisée dans un unique fichier au format binaire. L'ordre d'écriture des variables respecte la numérotation globale des cellules du maillage de sorte que l'écriture des fichiers de reprise soit indépendante du partitionnement du maillage. Cela permet d'effectuer une reprise du calcul en exécutant à nouveau le programme SLOSH sans aucune contrainte sur le nombre de processus. En pratique, l'écriture des fichiers de reprise est faite en utilisant les fonctions MPI d'écriture collective et le schéma d'accès à des zones non-contiguës du fichier est construit pour chaque processus en utilisant les mécanismes de vues sur les fichiers (*MPI_FILE_SET_VIEW*).

4.3.2.5 Parallélisation du module lagrangien

La discrétisation du modèle de spray est basée sur une méthode particulière (cf. §3.2.1) consistant à résoudre les équations des trajectoires d'un ensemble de particules numériques. Il est nécessaire d'identifier les cellules contenant chacune des particules afin de pouvoir à la fois interpoler les grandeurs de l'écoulement porteur vu par les particules, et évaluer les termes sources de couplage.

Pour cela, un algorithme de suivi de particules basé sur les travaux de Chordá *et al.* [19] a été implémenté au cours de cette thèse. Connaissant la cellule contenant une particule à l'instant t^n , celui-ci permet d'identifier efficacement la cellule contenant la particule à l'instant t^{n+1} . Cette opération est effectuée en parcourant de proche en proche la liste des cellules voisines dont les faces sont intersectées par la trajectoire de la particule au cours du pas de temps.

Dans le cadre de la méthode de décomposition de domaine, chaque processus est en charge de calculer les trajectoires des particules localisées dans le domaine qui lui est associé. Lorsque l'algorithme de suivi de particules détecte qu'une d'entre elles sort d'un domaine, celle-ci est envoyée au processus associé au domaine voisin (qui en aura ensuite la charge). Pour des raisons d'efficacité, les échanges des particules sont réalisés par paquets de données.

4.3.3 Évaluation des performances du code SLOSH

Nous avons évalué les performances du code SLOSH sur le supercalculateur STELVIO⁵ de l'ONERA. Les simulations ont été réalisées pour la configuration qui sera présentée lors de l'étude de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en régime non-linéaire (cf. paragraphe §5.1.2.2).

Les Figure 4.6a et Figure 4.6b montrent les résultats obtenus pour l'étude de scalabilité forte et faible respectivement. On observe que le code est capable d'exploiter pleinement les ressources de calcul disponibles sur ce calculateur : l'efficacité parallèle est de 90% pour un calcul sur 480 cœurs⁶ avec seulement 3000 cellules/cœur. Ces bonnes performances sont obtenues grâce à la méthode de recouvrement des communications qui permet de masquer les temps de communication tant que la charge de calcul par cœur est suffisamment importante.

5. Calculateur Altix ICE 8200 EX de SGI (processeurs Intel Nehalem X5560 et Intel Westmere X5675)

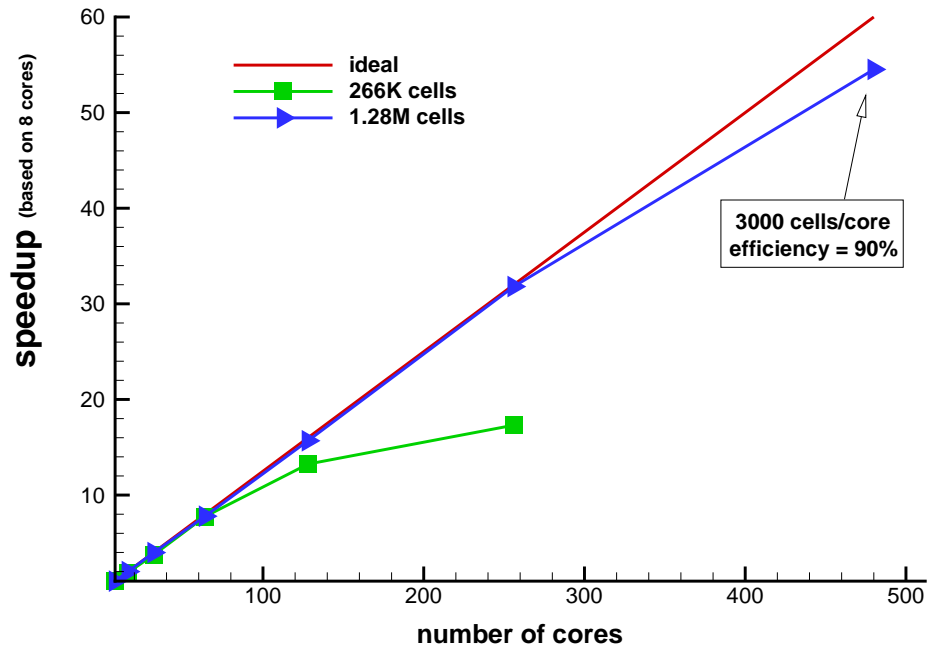
6. nombre maximal de cœurs qu'il était possible d'allouer pour un calcul sur STELVIO lors de cette étude

Les points d'inflexion sur chaque courbe de scalabilité forte correspondent à un chargement optimum d'environ 5000 cellules par cœur. Ce chargement optimum permet de minimiser le temps de calcul global tout en conservant une très bonne efficacité de la parallélisation.

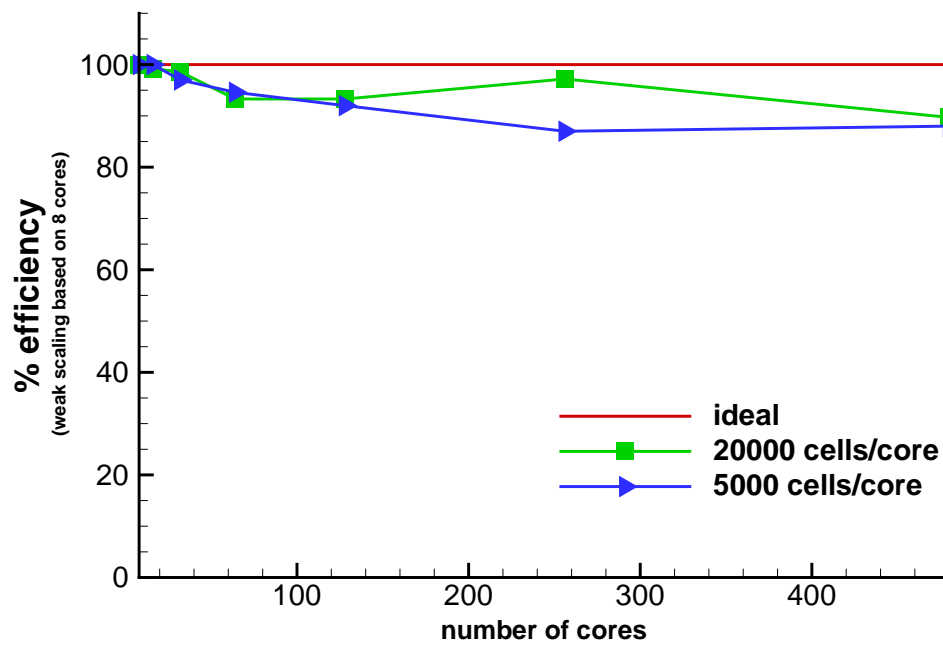
L'étude de la scalabilité faible montre que l'efficacité parallèle obtenue avec le chargement optimum ne se dégrade pas lorsqu'on augmente la taille du problème.

4.4 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté le code SLOSH, dans lequel toutes les méthodes développées au cours de cette thèse ont été implémentées. La stratégie que nous avons développée pour paralléliser ce code est également présentée. Celle-ci est basée sur une méthode de décomposition de domaine et l'utilisation du standard MPI. Les tests des performances montrent que la parallélisation permet d'exploiter pleinement les ressources des supercalculateurs à partir d'un chargement de 5000 cellules/cœur.



(a) Courbes de scalabilité forte



(b) Courbes de scalabilité faible

FIGURE 4.6 – Résultats de l'étude des performances de la parallélisation du code SLOSH (voir paragraphe §4.2.3 pour la définition de l'accélération et de l'efficacité)

Chapitre 5

Validations

Sommaire

5.1 Validation du solveur à phases séparées	99
5.1.1 Oscillation amortie d'une onde de surface	99
5.1.2 Instabilité de type Rayleigh-Taylor	101
5.1.2.1 Régime linéaire	103
5.1.2.2 Régime non-linéaire	106
5.1.3 Collisions binaires de gouttes	110
5.2 Validation du solveur spray	112
5.2.1 Validation du couplage pour la quantité de mouvement	112
5.2.2 Perte de charge dans un écoulement chargé en particules	114
5.3 Conclusion du chapitre	116

Dans ce chapitre, nous présentons une partie des cas tests académiques qui ont été réalisés au cours de cette thèse.

Les principaux objectifs de ces cas tests sont de valider l'implémentation numérique du modèle bifluide et du modèle de spray, et d'évaluer leur capacité à décrire correctement les mécanismes physiques élémentaires mis en jeu. Les résultats numériques obtenus sont comparés à des solutions de référence (qui sont analytiques, numériques ou expérimentales selon les cas).

5.1 Validation du solveur à phases séparées

5.1.1 Oscillation amortie d'une onde de surface

Ce cas test a pour objectif d'évaluer la capacité du code SLOSH à simuler l'oscillation amortie d'une onde de surface à l'interface entre deux fluides visqueux (Figure 5.1). En l'absence de gravité, une perturbation initiale sinusoïdale de l'interface oscille au cours du temps sous l'action des effets capillaires tout en étant amortie par l'action des effets visqueux. La compétition entre ces deux effets antagonistes pilote directement l'évolution de l'oscillation de l'interface.

Solution théorique

D'un point de vue théorique, Prosperetti [76] a proposé une solution analytique exacte de l'évolution d'une petite perturbation sinusoïdale de l'interface en résolvant le problème aux valeurs initiales dans le cas où les deux fluides ("Fluide 1" et "Fluide 2") de même viscosité

cinématique ($\nu_1 = \nu_2$) et dans le cas où le domaine physique est infiniment grand dans la direction verticale. Cette solution de référence est décrite dans la suite de ce paragraphe.

On considère une perturbation initiale d'une interface fixe de la forme :

$$a(x, t = 0) = a_0 \cos(kx) \quad (5.1)$$

où k est le nombre d'onde et a_0 est l'amplitude de la perturbation initiale ($a_0 \ll 2\pi k$). L'évolution temporelle de l'amplitude de la perturbation est alors donnée par :

$$a(x, t) = \frac{4(1 - 4\beta)\nu^2 k^4}{8(1 - 4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2} a(x, 0) \operatorname{erfc}(\nu k^2 t)^{1/2} + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \left(\frac{\omega_0^2 a(x, 0)}{z_i^2 - \nu k^2} \right) \exp\left((z_i^2 - \nu k^2)t\right) \operatorname{erfc}\left(z_i \sqrt{t}\right) \quad (5.2)$$

où les z_i sont les quatre racines de l'équation algébrique suivante :

$$z^4 - 4\beta(k^2\nu)^{1/2}z^3 + 2(1 - 6\beta)k^2\nu z^2 + 4(1 - 3\beta)(k^2\nu)^{3/2}z + (1 - 4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2 = 0 \quad (5.3)$$

et $Z_i = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 (z_j - z_i)$. Le paramètre adimensionnel β est donné par $\beta = \rho_1 \rho_2 / (\rho_1 + \rho_2)^2$ et la fréquence d'oscillation dans le cas non-visqueux est donnée par $\omega_0 = \sigma k / (\rho_1 + \rho_2)$.

Configurations et paramètres de simulation

Deux configurations ont été étudiées en faisant varier les propriétés des fluides situés de part et d'autre de l'interface. Pour le cas (1), on choisit deux fluides identiques de part et d'autre de l'interface : "Fluide 1"="Fluide 2"="Fluide A" (Tableau 5.1). Pour le cas (2), on choisit deux fluides différents : "Fluide 1"="Fluide A" et "Fluide 2"="Fluide B". Les propriétés des fluides utilisés dans le cas (2) entraînent un fort rapport de densité à l'interface ($\rho_1/\rho_2 = 1000$). Dans les deux cas, la tension de surface est égale à $\sigma = 0.1 N.m^{-1}$.

Les simulations ont été réalisées avec des maillages cartésiens, uniformes et rectangulaires de taille $(L_x = 2\pi) \times (L_y = 4\pi)$, et avec un nombre d'onde $k = 1$ (Figure 5.1). Une étude de convergence spatiale a été effectuée en faisant varier la résolution du maillage de $\Delta x = L_x/8$ à $\Delta x = L_x/64$. Des conditions limites périodiques sont prescrites sur les parois verticales et des conditions de type parois glissantes sont imposées sur les parois horizontales.

	ρ_0 ($kg.m^{-3}$)	c_0 ($m.s^{-1}$)	p_0 (hPa)	ν ($m^2.s^{-1}$)	σ ($N.m^{-1}$)
Fluide A	1000	1490	1013	0.001	0.1
Fluide B	1	340	1013	0.001	

Tableau 5.1 – Propriétés des fluides utilisés selon les cas considérés lors des simulations de l'oscillation d'onde de surface.

Résultats

La Figure 5.2 montre l'évolution temporelle de l'amplitude de l'oscillation de l'interface qui a été obtenue numériquement pour le cas (1) et le cas (2) en utilisant les différents maillages. On peut observer que la solution analytique de Prosperetti [76] et les résultats numériques sont en bon accord pour les deux cas : la fréquence d'oscillation de l'interface

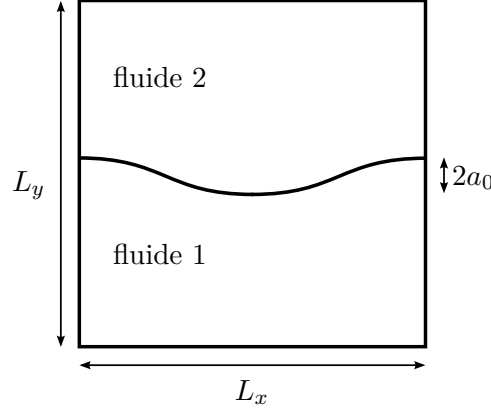


FIGURE 5.1 – Configuration géométrique pour la simulation de l’oscillation amortie d’une onde de surface.

est bien retrouvée numériquement et le taux d’amortissement des oscillations obtenu par le calcul est d’autant plus proche de la solution analytique que le maillage est fin.

Pour étudier la convergence en maillage d’un point de vue quantitatif, on définit l’erreur Err entre le résultat numérique a_{num} et le résultat analytique a_{th} par :

$$Err = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |a_{num}(t_i) - a_{th}(t_i)| \quad (5.4)$$

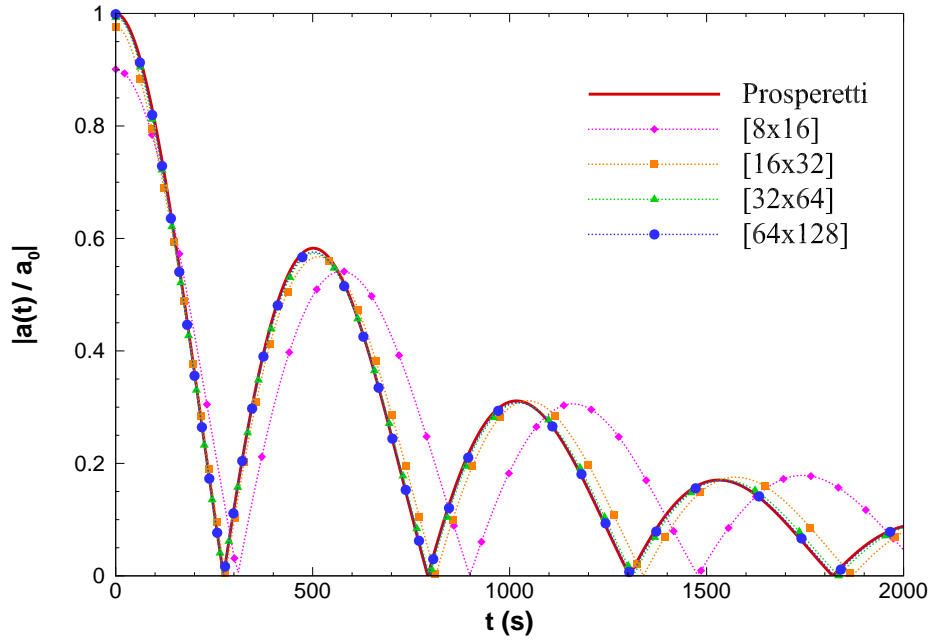
L’évolution de l’erreur en fonction de la résolution du maillage est reportée dans le [Tableau 5.2](#). Le taux de convergence, défini par (5.5), est aussi donné dans le [Tableau 5.2](#).

$$q = \frac{\ln(Err_{(2\Delta x)}) - \ln(Err_{(\Delta x)})}{\ln(2)} \quad (5.5)$$

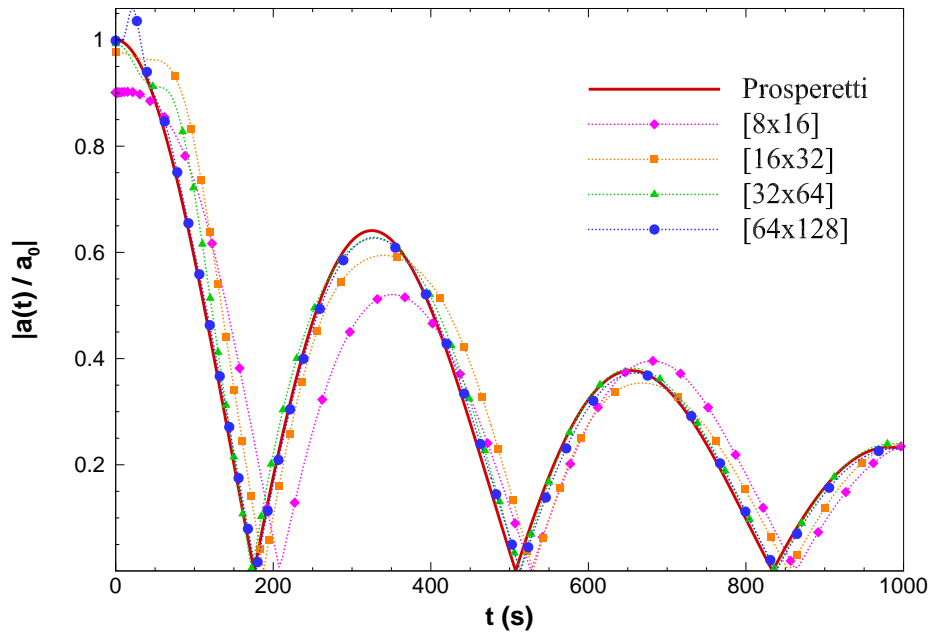
Nous pouvons remarquer que le taux de convergence décroît assez rapidement lorsque la résolution du maillage augmente et ce quelque soit le rapport de densité entre les deux fluides considérés. Un taux de convergence faible a aussi été rapporté dans d’autres travaux basés sur des méthodes VOF, Level-Set et de Front-Tracking [21, 102, 67, 74]. Popinet et Zaleski [74] ont émis l’hypothèse que la dégradation de la convergence est due au fait que la solution numérique ne tend pas exactement vers la solution analytique, car cette dernière est uniquement valable pour un domaine infiniment grand. Toutefois, d’après Oevermann *et al.* [67], le fait de doubler la hauteur du domaine de calcul n’influe que très peu sur la convergence vers la solution analytique. Compte-tenu de ces remarques et des résultats présents dans la littérature pour des paramètres similaires, les taux de convergence obtenus sont tout à fait cohérents et les résultats obtenus sont satisfaisants.

5.1.2 Instabilité de type Rayleigh-Taylor

L’instabilité de Rayleigh-Taylor peut être observée lorsqu’un fluide lourd est placé au dessus d’un fluide plus léger. Cette situation peut conduire à un équilibre instable de l’interface qui est soumise à la fois aux effets déstabilisants liés à la force de gravité et aux effets stabilisants des forces de tension de surface. D’un point de vue numérique, l’étude de cette instabilité est un cas test classique qui permet d’effectuer des comparaisons quantitatives entre les solutions analytiques et les solutions numériques pour le régime linéaire de l’instabilité (c’est-à-dire pour de petites déformations de l’interface) et des comparaisons plus qualitatives avec des méthodes numériques d’ordre élevé dans le régime non-linéaire (c’est-à-dire pour de grandes déformations de l’interface).



(a) cas 1 : $\rho_1/\rho_2 = 1$



(b) cas 2 : $\rho_1/\rho_2 = 1000$

FIGURE 5.2 – Évolution temporelle de l'amplitude de l'oscillation de l'onde de surface. Comparaison entre les résultats numériques et analytiques pour différents rapports de densité et différentes résolutions spatiales.

	maillage	Err	q
$\rho_1/\rho_2 = 1$	8×16	6.669×10^{-2}	–
	16×32	1.921×10^{-2}	1.80
	32×64	5.647×10^{-3}	1.77
	64×128	2.528×10^{-3}	1.16
$\rho_1/\rho_2 = 1000$	8×16	1.530×10^{-1}	–
	16×32	4.990×10^{-2}	1.62
	32×64	1.823×10^{-2}	1.45
	64×128	1.348×10^{-2}	0.44

Tableau 5.2 – Résultats de l’étude de la convergence en maillage pour la simulation de l’oscillation d’une onde de surface.

5.1.2.1 Régime linéaire

Sous l’hypothèse de la théorie de la stabilité linéaire, une petite perturbation initiale sinusoïdale de l’interface de la forme $a(x) = a_0 \cos(kx)$ entre deux fluides non-visqueux croît en temps selon une loi exponentielle $\exp(nt)$ avec n défini par :

$$n^2 = kg \left(\frac{\rho_h - \rho_l}{\rho_h + \rho_l} - \frac{k^2 \sigma}{g(\rho_h + \rho_l)} \right) \quad (5.6)$$

où σ est le coefficient de tension de surface, g est l’intensité de la gravité, k le nombre d’onde associé à la perturbation, et où ρ_l et ρ_h sont respectivement la densité du fluide le plus léger et la densité du fluide le plus lourd.

L’équation (5.6) est la relation de dispersion qui permet de connaître le taux d’amplification d’une onde en fonction de son nombre d’onde k . Nous avons effectué des simulations numériques pour vérifier si les résultats numériques permettent bien de retrouver la relation de dispersion (5.6).

Paramètres de la simulation

Les paramètres choisis pour effectuer les simulations sont similaires à ceux choisis par Oevermann *et al.* [67], qui ont effectué la même étude pour des fluides incompressibles. On considère un domaine bidimensionnel de taille $L_x \times L_y$, avec des conditions périodiques sur les parois verticales et des conditions de glissement sur les parois horizontales. Les propriétés physiques des deux fluides non-visqueux sont données dans le [Tableau 5.3](#). À l’instant initial, l’interface plane entre les deux fluides, située à mi-hauteur du domaine, est déstabilisée par une perturbation sinusoïdale de très faible amplitude a_0 . L’équation de l’interface est alors donnée par :

$$y_{int}(x, t = 0) = 0.5L_y + a_0 \cos(kx) \quad (5.7)$$

Les paramètres géométriques sont donnés dans le [Tableau 5.4](#). Dans l’équation (5.7), l’ajout d’une petite perturbation initiale de l’interface permet de sélectionner facilement le mode instable qui va se développer le plus rapidement. On a veillé toutefois à choisir une amplitude initiale de perturbation assez faible par rapport à sa longueur d’onde afin que la relation de dispersion (5.6) soit valide.

Compte-tenu des conditions du cas test, la stabilité marginale ($n = 0$) est obtenue pour $\sigma_c = 20N.m^{-1}$. Afin de balayer l’ensemble du domaine d’instabilité, des simulations ont été

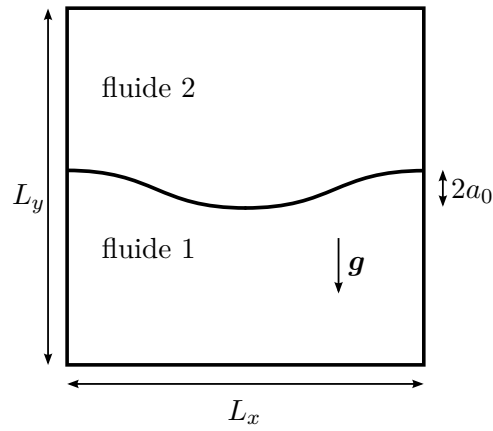


FIGURE 5.3 – Configuration du cas test de l’instabilité de Rayleigh-Taylor.

	ρ_0 ($kg.m^{-3}$)	c_0 ($m.s^{-1}$)	p_0 (hPa)	μ ($Pa.s$)
Fluide 1	1	340	1013	0
Fluide 2	3	914	1013	0

Tableau 5.3 – Propriétés des fluides utilisés pour la simulation de l’instabilité de Rayleigh-Taylor dans le régime linéaire.

L_x (m)	L_y (m)	k	a_0 (m)	g ($m.s^{-2}$)
2π	4π	1	$0.002L_x$	-10

Tableau 5.4 – Paramètres utilisés pour la simulation de l’instabilité de Rayleigh-Taylor dans le régime linéaire.

effectuées pour différentes valeurs du coefficient de tension de surface : $\sigma/\sigma_c = \{0.1, 0.25, 0.5, 0.8, 0.9\}$. Une étude de convergence en maillage a aussi été réalisée en utilisant des maillages de différentes tailles (16×32 , 32×64 , 64×128 , 128×256).

Résultats

D'après l'étude de stabilité linéaire, la position de l'interface est déterminée au cours du temps par :

$$y_{int}(x, t) = 0.5L_y + a(x, t) \quad (5.8)$$

avec $a(x, t) = \cos(kx) \exp(nt)$. Cette expression permet de déterminer le taux d'amplification n de la perturbation en calculant la pente de la fonction $\ln(a(x=0, t)/a_0)$. Sur la [Figure 5.4](#), où sont représentées les évolutions de $\ln(a(x=0, t)/a_0)$ pour différentes valeurs σ , on remarque qu'il y a une petite phase transitoire avant d'atteindre l'évolution linéaire prévue par la stabilité linéaire. Cette phase transitoire a aussi été observée par Couderc [21] sans que l'auteur puisse en expliquer les origines. On remarque également sur la [Figure 5.4](#) que le signal devient de plus en plus bruité lorsque le coefficient de tension de surface augmente, ce qui pourrait s'expliquer par la présence de courants parasites de plus en plus importants pour des grandes valeurs de σ . Ces courants parasites sont généralement imputés aux erreurs numériques commises lors du calcul de la courbure de l'interface et à un déséquilibre au niveau discret entre les forces capillaires et les contraintes de pression [31, 64].

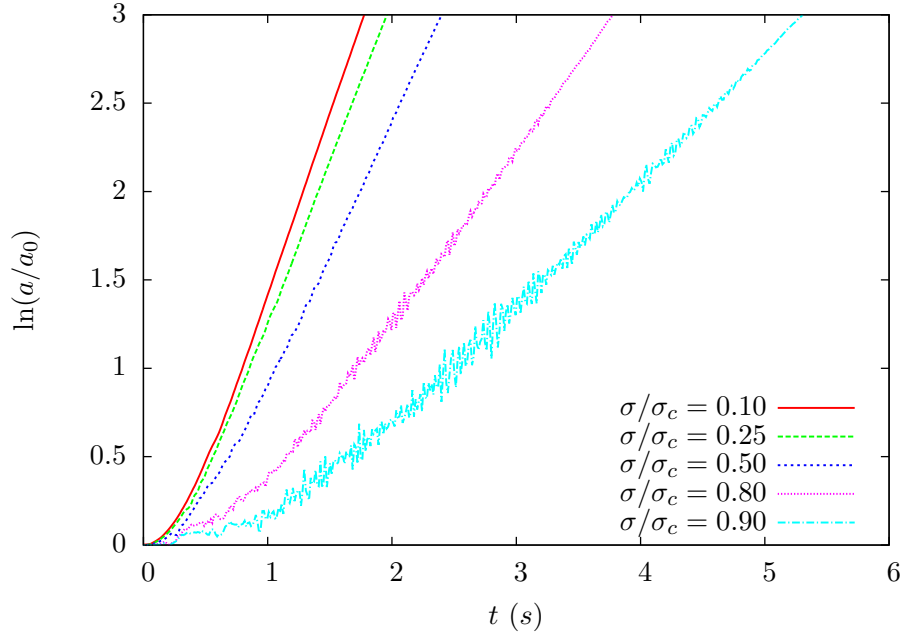


FIGURE 5.4 – Évolution temporelle de l'amplitude de la perturbation a au cours du temps à la position $x = 0$ en fonction du coefficient de tension de surface avec un maillage 128×256 .

Compte-tenu des remarques précédentes, le calcul de n est effectué en considérant uniquement la portion $1 \leq \ln(a/a_0) \leq 3$ des courbes. Sur la [Figure 5.5](#), les valeurs de n obtenues numériquement sont superposées à la courbe obtenue grâce à la relation de dispersion (5.6). On observe que les valeurs de n obtenues numériquement sont proches des valeurs théoriques même si elles sont légèrement sous-estimées pour les faibles valeurs de la tension de surface. Ce comportement a aussi été rapporté dans le cas où une méthode Level-Set est utilisée pour

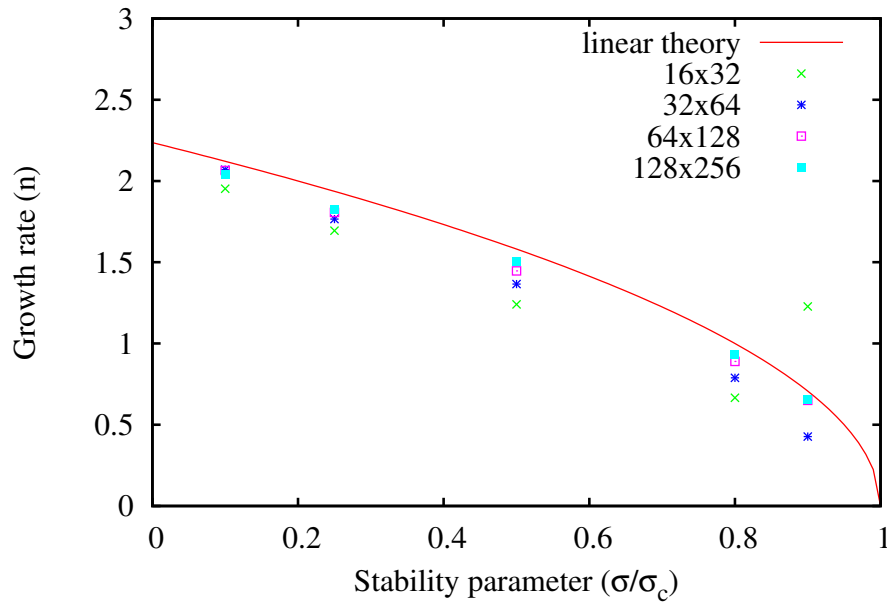


FIGURE 5.5 – Diagramme de dispersion de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Comparaison entre le relation de dispersion théorique (5.6) et les taux de croissance calculés par les simulations.

	maillage	n_{num}	Err	q
$\sigma/\sigma_c = 0.5$	16×32	1.307	0.215	—
	32×64	1.418	0.136	0.66
	64×128	1.459	0.0851	0.68
	128×256	1.527	0.0483	0.82
$\sigma/\sigma_c = 0.8$	16×32	0.691	0.334	—
	32×64	0.795	0.212	0.66
	64×128	0.919	0.110	0.94
	128×256	0.992	0.0680	0.69

Tableau 5.5 – Résultats de l'étude de la convergence en maillage pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh Taylor en régime linéaire.

la description de l'interface [21, 67, 102]. L'évolution de l'erreur commise sur le taux d'amplification n en fonction de la résolution spatiale du maillage est donnée dans le Tableau 5.5 pour $\sigma/\sigma_c = 0.5$ et σ/σ_c . Le taux de convergence vers la solution analytique y est aussi donné. On observe que le taux de convergence est globalement proche de $q = 0.7$. Cette valeur est légèrement inférieure aux taux de convergence obtenus avec des méthodes Levet-Set [21, 67, 102].

5.1.2.2 Régime non-linéaire

Au bout d'un temps assez long, la croissance des instabilités conduit à une déformation complète de l'interface. La capture de l'interface peut alors s'avérer complexe notamment à cause de la formation de petits filaments qui sont étirés au cours du temps.

La simulation de ce régime permet d'évaluer la capacité des méthodes numériques déve-

loppées dans cette thèse à donner une description fidèle des mécanismes de déformation de l'interface. Comme il n'existe pas de solution analytique à ce problème, on choisit comme référence les solutions obtenues avec une méthode de suivi d'interface ("Front-tracking") et une méthode "VOF/PLIC" par Popinet et Zaleski [74]. Les propriétés des fluides sont données dans le [Tableau 5.6](#) et les autres paramètres de simulation sont détaillés dans le [Tableau 5.7](#). Les simulations ont été effectuées en utilisant des maillages cartésiens et uniformes de différentes résolutions : 32×128 , 64×256 , 128×512 , 256×1024 .

	ρ_0 ($kg.m^{-3}$)	c_0 ($m.s^{-1}$)	p_0 (hPa)	μ ($Pa.s$)	σ ($N.m^{-1}$)
Fluide 1	0.1694	340	1013	3.13	0
Fluide 2	1.225	914	1013	3.13	

Tableau 5.6 – Propriétés des fluides utilisés pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le régime non-linéaire.

L_x (m)	L_y (m)	k	a_0 (m)	g ($m.s^{-2}$)
1	4	1	0.05	-9.81

Tableau 5.7 – Paramètres utilisés pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le régime non-linéaire.

Résultats

L'évolution temporelle de la solution obtenue avec le maillage (256×1024) est représentée sur la [Figure 5.6](#). On peut observer la déformation de l'interface entre les deux fluides qui conduit à la formation d'un "champignon" et de deux ligaments très étirés. Les résultats de l'étude de la convergence en maillage ([Figure 5.7](#)) montrent qu'une résolution de (128×512) est suffisante pour capturer correctement les ligaments.

La [Figure 5.8](#) montre une comparaison au temps final $t = 0.9s$ entre le résultat obtenu avec notre code SLOSH et des résultats de référence extraits de [74]. On peut observer que la méthode de "front-tracking" ([Figure 5.8.a](#)) est celle qui préserve le mieux les petites structures grâce à la description lagrangienne de l'interface permettant d'avoir une taille caractéristique des plus petites structures descriptibles qui soit indépendante du maillage eulérien. Si on compare le résultat de la méthode "VOF/PLIC" ([Figure 5.8.b](#)) et de notre méthode à interface diffuse ([Figure 5.8.c](#)) en utilisant un maillage identique, on remarque que les résultats sont très proches : la profondeur de pénétration du "champignon" est quasiment identique. De plus, la taille et la position des ligaments sont aussi très proches. Toutefois, on peut noter une différence entre la façon dont dégénère ces deux méthodes dans le cas où les ligaments deviennent sous-résolus : la méthode "VOF/PLIC" a tendance à fragmenter artificiellement l'interface en petites gouttes dont la taille caractéristique est proche de celle de la maille, alors que la méthode à interface diffuse aura tendance à diffuser l'interface sur une échelle de 2 ou 3 mailles. Ces phénomènes, liés à la sous-résolution de l'interface, ne sont pas gênants tant qu'ils n'affectent pas les mécanismes physiques globaux qui pilotent l'évolution à grande échelle, ce qui est le cas ici.

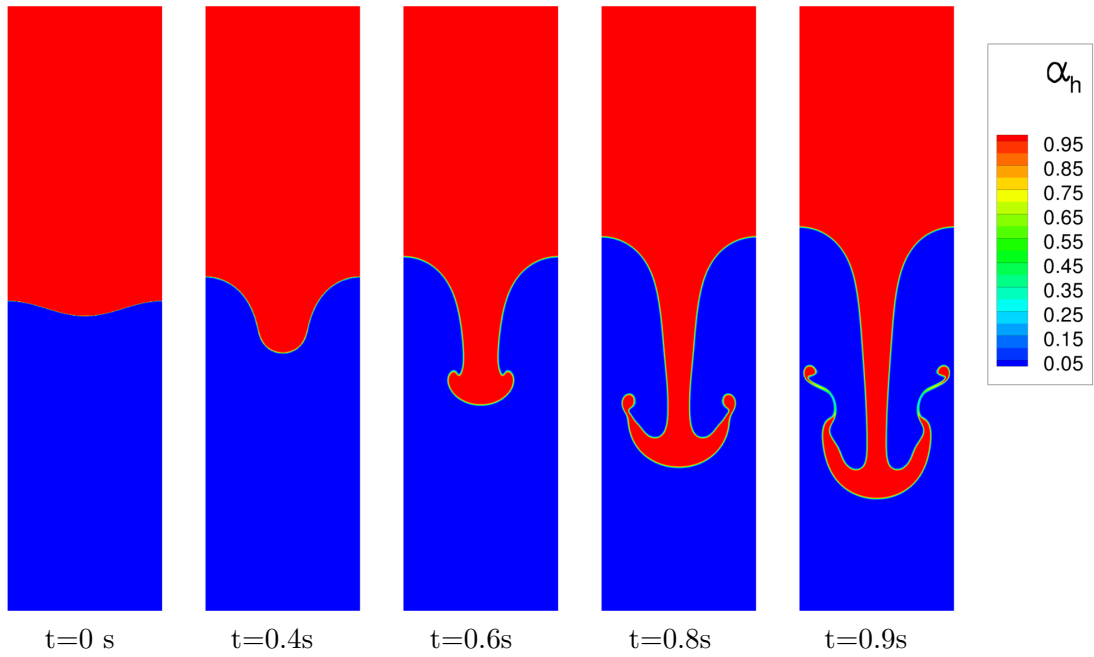


FIGURE 5.6 – Évolution temporelle de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en régime non-linéaire. Simulation effectuée sur un maillage (256×1024) . (Le champ α_h désigne la fraction volumique du fluide 2.)

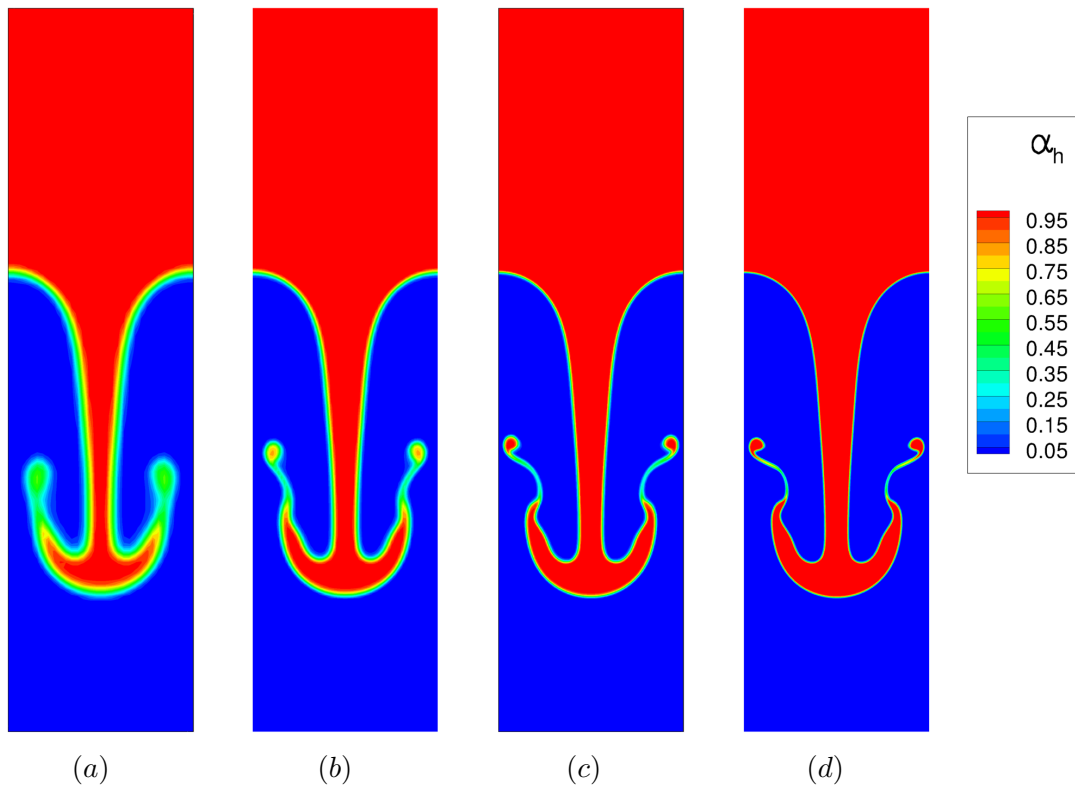


FIGURE 5.7 – Comparaison au temps final $t = 0.9s$ des résultats des simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor effectuées avec différentes résolutions du maillage : (a) 32×128 , (b) 64×256 , (c) 128×512 , (d) 256×1024 . (Le champ α_h désigne la fraction volumique du fluide 2.)

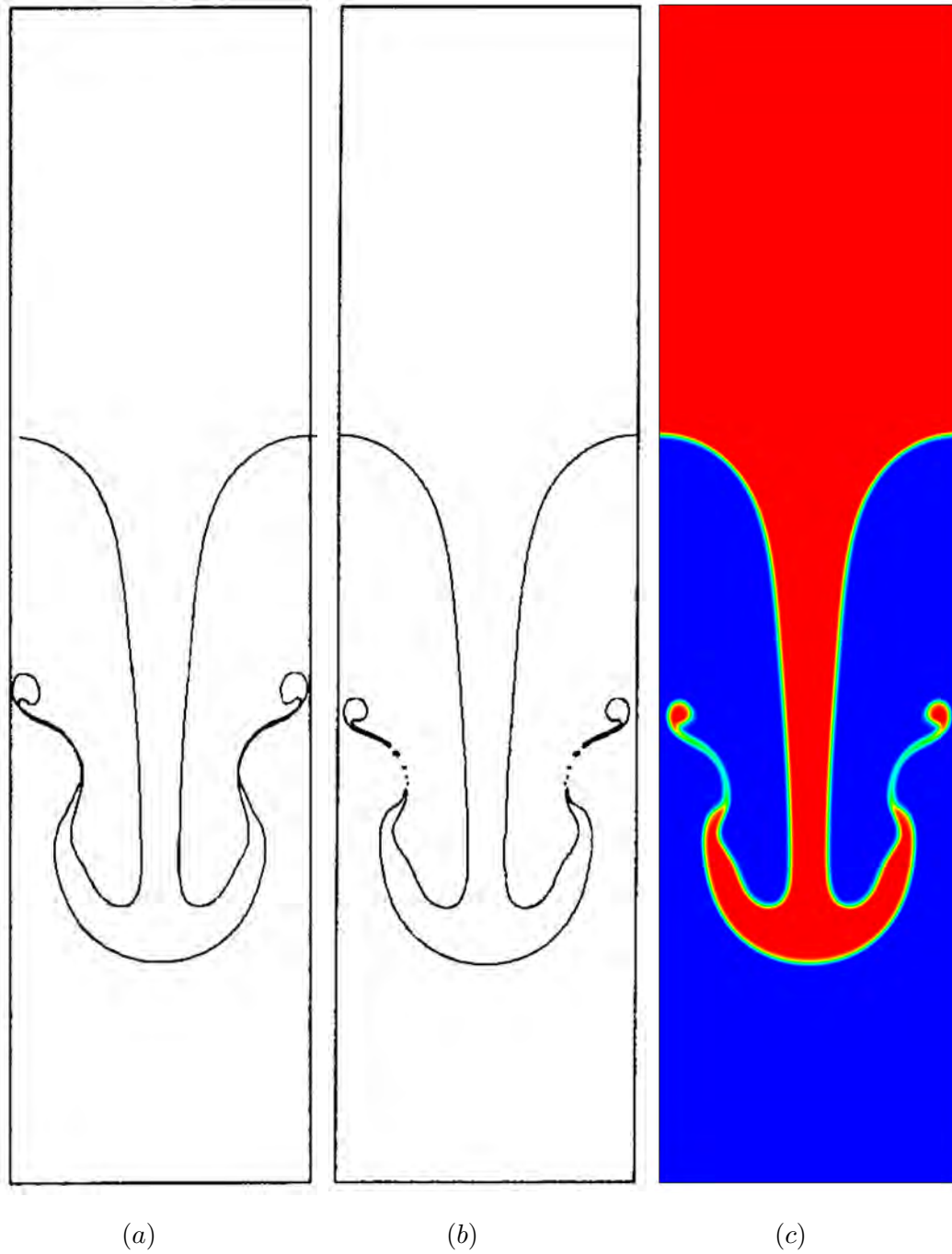


FIGURE 5.8 – Comparaison au temps final $t = 0.9s$ entre un résultat de simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor obtenu avec SLOSH et les résultats de référence. (a) : méthode de "front-tracking" avec un maillage 64×256 [74], (b) : méthode "VOF/PLIC" avec un maillage 128×512 [74], (c) méthode à interface diffuse du code SLOSH avec un maillage 128×512 .

5.1.3 Collisions binaires de gouttes

Des simulations numériques de collisions binaires de gouttes ont été réalisées pour évaluer la capacité de notre approche à traiter les situations où la compétition entre les mécanismes inertiels et capillaires joue un rôle important. Pour permettre la validation du code, on a choisi de reproduire numériquement les expériences de Ashgriz et Poo [5] en définissant les paramètres physiques de nos simulations tels qu'ils soient les plus proches possibles des paramètres expérimentaux connus. Dans [5], les auteurs ont classé les régimes de collision frontale de deux gouttes de même taille selon deux nombres caractéristiques : le nombre de Weber associé aux gouttes We_g et le nombre d'Ohnesorge Oh . Ces nombres sont définis par :

$$We_g = \frac{\rho_l V_r^2 d_g}{\sigma} \quad (5.9)$$

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma d_g}} \quad (5.10)$$

où ρ_l et μ_l sont respectivement la densité et la viscosité dynamique du liquide constituant les gouttes, V_r est la vitesse relative d'impact entre les deux gouttes, d_g est le diamètre des gouttes, et σ est le coefficient de tension de surface.

Parmi les différents régimes de collision observés dans [5], le régime de coalescence suivi de séparation est un régime relativement complexe qui conduit à des déformations importantes de l'interface jusqu'à sa rupture lors de la séparation. Pour cette raison, ce régime a été exploré afin d'éprouver le modèle et les méthodes numériques. Deux cas ont été étudiés dans ce régime de collision en faisant varier le nombre de Weber (5.9) :

- ▷ Cas 1 : séparation sans formation de satellite.
- ▷ Cas 2 : séparation avec formation d'un satellite.

Les nombres adimensionnels pour ces deux cas sont donnés dans le [Tableau 5.8](#).

	We_g	Oh
Cas 1	23	0.0047
Cas 2	40	

Tableau 5.8 – Nombre adimensionnel caractérisant les deux cas simulés de collisions binaires de gouttes.

Paramètres et configuration de la simulation

Les expériences étant faites avec des gouttes d'eau dans de l'air, les mêmes fluides ont été utilisés avec les propriétés données dans le [Tableau 5.9](#). La taille des gouttes a été déterminée à partir du nombre d'Ohnesorge et la vitesse initiale des gouttes a été calculée à partir du nombre de Weber souhaité dans chaque cas. Les valeurs retenues sont données dans le [Tableau 5.10](#).

Pour le cas 1, la simulation a été effectuée en 3D sur un domaine de taille $[0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ en tenant compte des trois plans de symétrie du problème qui sont représentés en rouge sur la [Figure 5.9a](#). Pour le cas 2, la simulation a été effectuée avec la version 2D axisymétrique du code SLOSH afin de valider cette variante. La configuration géométrique du cas 2 est schématisée sur la [Figure 5.9b](#), où l'axe de symétrie est représenté en rouge. Pour les deux cas, le domaine est discrétisé avec un maillage cartésien et uniforme dont les caractéristiques sont données dans le [Tableau 5.10](#).

	ρ_0 ($kg.m^{-3}$)	c_0 ($m.s^{-1}$)	p_0 (hPa)	μ ($Pa.s$)	σ ($N.m^{-1}$)
Eau	1000	1490	1013	1.137×10^{-3}	0.072
Air	1.226	340	1013	1.78×10^{-5}	

Tableau 5.9 – Propriétés des fluides utilisés pour les simulations de collisions binaires de gouttes.

	L_x (mm)	L_y (mm)	L_z (mm)	d_g (mm)	h (mm)	V_r ($m.s^{-1}$)	$d_g/\Delta x$
Cas 1	1	1	2	0.4	0.8	0.72	96
Cas 2	1	—	2	0.4	0.8	0.95	288

Tableau 5.10 – Paramètres utilisés pour les simulations de collisions de gouttes

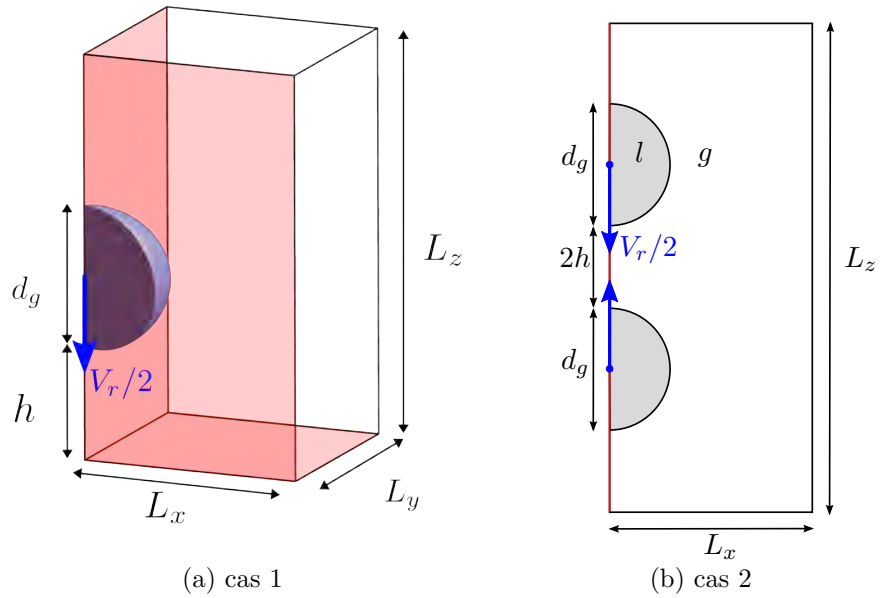


FIGURE 5.9 – Configurations géométriques pour les deux cas de simulations de collisions de gouttes. (a) : configuration 3D pour le cas 1. (b) : configuration 2D axisymetrique pour le cas 2.

Résultats

Pour les deux cas considérés, les clichés expérimentaux [5] pris à différents instants ont été juxtaposés aux résultats numériques. Comme ces clichés ne sont pas datés, il n'est pas possible d'effectuer des comparaisons rigoureuses entre l'expérience et les résultats numériques. Toutefois, nous pouvons vérifier qualitativement que le comportement global et les différentes étapes de la collision sont bien reproduits numériquement. Notamment, pour le cas 1 (Figure 5.10a) nous obtenons bien une coalescence suivie d'une séparation sans formation de satellite et pour le cas 2 (Figure 5.10b) nous observons le même régime avec la formation d'un satellite suite à la phase de séparation. La taille du satellite obtenue numériquement semble très proche de celle observée expérimentalement.

La résolution des maillages utilisés pour effectuer nos simulations (cf. Tableau 5.10) est plus importante que celle utilisée par Tanguy [87] avec une méthode Level-Set, pour les mêmes configurations. Ceci s'explique par le fait que, avec l'approche à interface diffuse, la collision entre deux gouttes peut "emprisonner" une petite quantité d'air au niveau du point d'impact. Dans cette application, la présence d'une petite bulle d'air telle que celle-ci peut avoir des conséquences importantes sur les déformations qui suivent la collision. Par exemple, celle-ci peut conduire à une rupture artificielle ou prématurée de la membrane qui se forme pendant les grandes déformations de l'interface (notamment dans le cas à Weber=40). Afin de limiter la taille de cette bulle d'air (et donc son influence), nous avons donc augmenté la résolution du maillage.

5.2 Validation du solveur spray

5.2.1 Validation du couplage pour la quantité de mouvement

Le cas test présenté dans ce paragraphe a pour but de vérifier si le couplage entre les équations de quantité de mouvement du fluide dans le modèle bifluide et des particules dans le modèle de spray est correctement mis en œuvre numériquement. Ce cas test s'appuie sur un cas de validation similaire développé dans [34].

Configuration

On considère un domaine carré périodique de taille (L^2) et discrétisé par un maillage cartésien et uniforme de pas Δx . À l'instant initial, le domaine est rempli de gaz au repos ($\|\mathbf{v}_g(0)\| = 0m/s$) et on injecte des particules de diamètre d_p et à la vitesse $\|\mathbf{v}_p(0)\| = 30m/s$ selon l'axe x dans chaque cellule du maillage. Dans cette configuration la solution analytique des équations locales de quantité de mouvement pour le gaz et les particules est indépendante du point considéré dans le domaine. Dans cette configuration, les équations simplifiées de la quantité de mouvement pour le gaz et les particules s'écrivent sous la forme du système suivant :

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p}(\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_p) \\ \frac{d\mathbf{v}_g}{dt} = -\frac{r}{\tau_p}(\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_p) \end{cases} \quad (5.11)$$

où $r = m_p/(\rho_g(\Delta x)^2)$ et m_p désigne la masse d'une particule. En faisant l'hypothèse que le nombre de Reynolds de la particule Re_p (cf. (3.9)) est constant dans l'expression (3.14) de

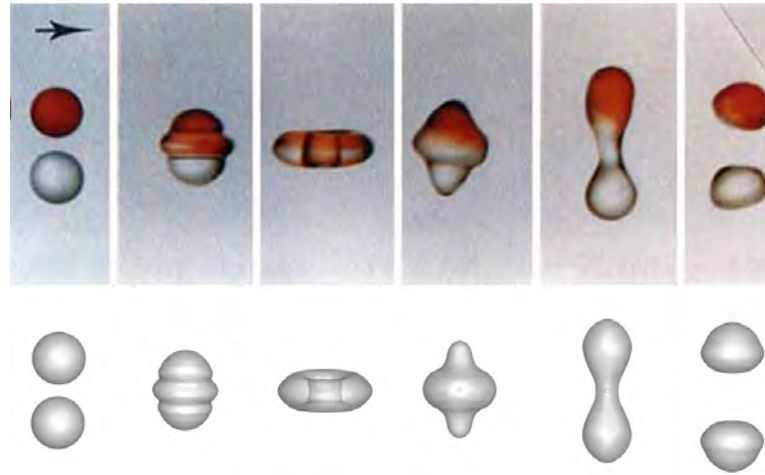
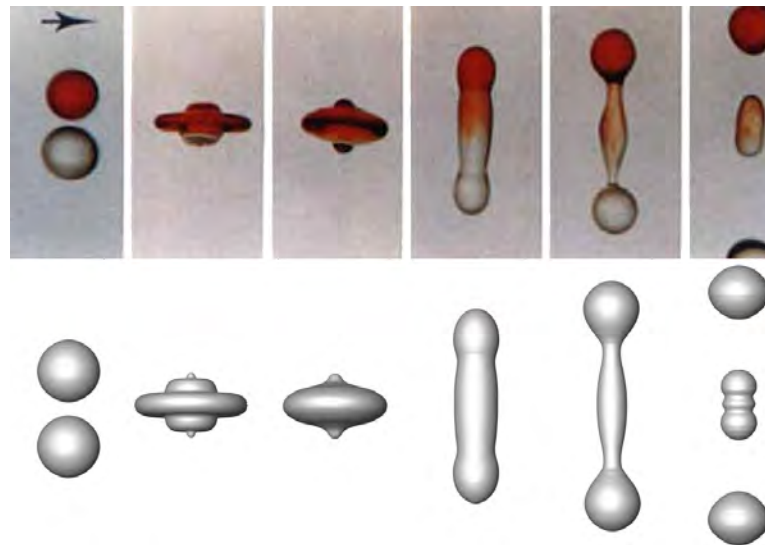
(a) Cas 1 : $We = 23$ (b) Cas 2 : $We = 40$

FIGURE 5.10 – Comparaison entre les résultats expérimentaux [5] et les résultats numériques pour les deux cas de collision de gouttes. Première rangée : clichés expérimentaux. Seconde rangée : résultats numériques (iso-surface de fraction volumique liquide $\alpha_l = 0.5$ symbolisant l'interface).

τ_p , la solution analytique du système (5.11) est :

$$\begin{cases} \mathbf{v}_p = \mathbf{v}_p(0) \frac{1}{1+r} \left[r + \exp\left(-\frac{1}{\tau_p}(r+1)t\right) \right] \\ \mathbf{v}_g = \mathbf{v}_p(0) \frac{r}{1+r} \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{\tau_p}(r+1)t\right) \right] \end{cases} \quad (5.12)$$

La solution analytique (5.12) du système permet vérifier les résultats de simulation obtenus pour le transfert de quantité de mouvement. De plus, on peut vérifier que la quantité de mouvement totale du gaz et des particules se conserve :

$$\rho_g L^2 \mathbf{v}_g(t) + \mathcal{N}_c m_p^{(num)} \mathbf{v}_p(t) = cste = \mathcal{N}_c m_p^{(num)} \mathbf{v}_p(0) \quad (5.13)$$

Les paramètres numériques utilisés pour le gaz et les particules sont donnés dans le [Tableau 5.11](#). Pour le maillage, on a choisi $L = 1m$ et $\Delta_x = 0.1m$ d'où on en déduit $\mathcal{N}_c = (L/\Delta x)^2 = 100$.

Gaz			Particules		
ρ_0	1	$kg.m^{-3}$	ρ_p	1000	$kg.m^{-3}$
c_0	340	$m.s^{-1}$	d_p	10^{-4}	m
p_0	1013	hPa	$\mathbf{v}_p(0)$	30	$m.s^{-1}$
μ	10^{-5}	$Pa.s$	$m_p^{(num)}$	10^{-4}	kg

Tableau 5.11 – Propriétés du gaz et des particules utilisées pour les simulations concernant la validation du couplage pour la quantité de mouvement.

Résultats

Sur la [Figure 5.11b](#), les courbes analytiques représentant l'évolution temporelle de la quantité de mouvement dans le gaz et l'ensemble des particules sont superposées aux résultats numériques obtenus avec le code SLOSH. Nous pouvons observer que les résultats numériques sont en très bon accord avec les résultats analytiques. On observe une décélération des particules qui transfèrent leur quantité de mouvement au gaz. Le gaz est alors accéléré de sorte que la quantité de mouvement totale du système (gaz+particules) soit conservée.

5.2.2 Perte de charge dans un écoulement chargé en particules

Ce cas test a pour but de valider le couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray dans le cas où on considère un écoulement porteur de gaz transportant un ensemble de particules injectées à faible vitesse dans une conduite. La différence de vitesse entre les particules injectées et l'écoulement de gaz doit conduire à une perte de charge de l'écoulement gazeux entre l'entrée et la sortie de la conduite. L'enjeu est donc de vérifier si la simulation numérique permet d'obtenir la valeur de la perte de charge calculée analytiquement.

Configuration

On considère une conduite 1D de longueur L et de section S ([Figure 5.12](#)). À l'entrée de la conduite $x_0 = 0$, on injecte un débit $\dot{m}_g^{(1)}$ de gaz. En sortie de la conduite $x_L = L$, on impose une pression constante pour le gaz $p_g^{(2)} = p_{0,g}$, à partir de laquelle on en déduit la densité :

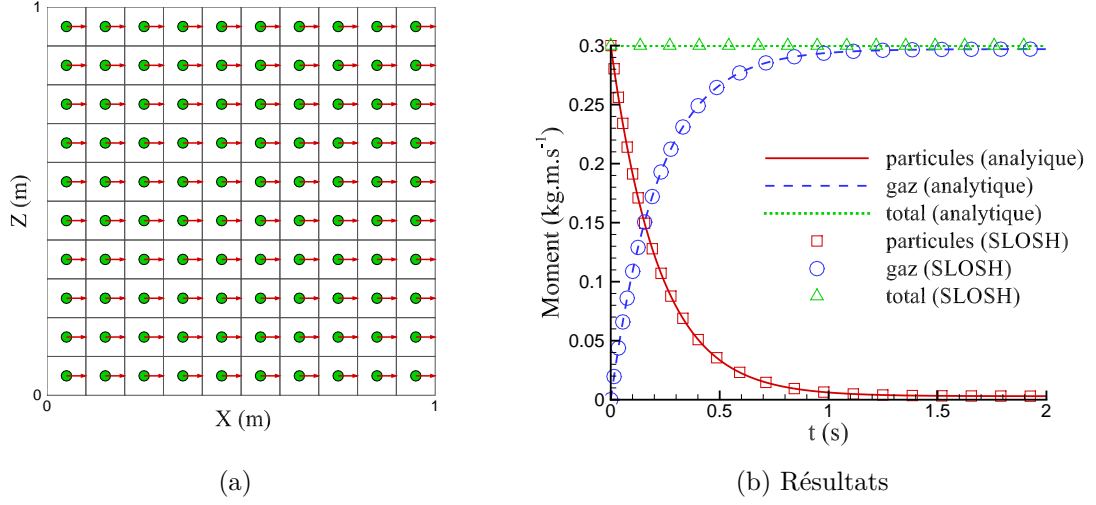


FIGURE 5.11 – Cas de validation du couplage entre le solveur à phases séparées et le solveur à phase dispersée. (a) : Configuration du maillage avec une particule par cellule. (b) : Comparaison des résultats analytiques et numériques pour l'évolution temporelle de la quantité du mouvement.

$\rho_g^{(2)} = \rho_{0,g}$. À l'abscisse $x_{inj} = 2L/5$, on injecte des particules de taille d_p à la vitesse $V_p^{(1)}$ pour un débit total de particules injectées $\dot{m}_p^{(1)}$.

La longueur de la conduite a été choisie de sorte que l'on puisse faire l'hypothèse que les particules et le gaz ont atteint une vitesse d'équilibre en sortie : $V_p^{(2)} = V_g^{(2)}$. Ceci est vérifié si le temps de relaxation d'une particule τ_p est bien plus petit que le temps de résidence τ_{res} d'une particule dans la conduite. La valeur du temps τ_{res} peut être approximée par :

$$\tau_{res} \approx \frac{L}{\max(V_g^{(1)}, V_p^{(1)})} \quad (5.14)$$

En régime établi, le bilan de quantité de mouvement entre l'entrée et la sortie de la conduite s'écrit :

$$\Delta p S = (\dot{m}_g^{(2)} V_g^{(2)} + \dot{m}_p^{(2)} V_p^{(2)}) - (\dot{m}_g^{(1)} V_g^{(1)} + \dot{m}_p^{(1)} V_p^{(1)}) \quad (5.15)$$

où $\Delta p = (p_g^{(2)} - p_g^{(1)})$. En supposant la variation de densité du gaz négligeable entre l'entrée et la sortie de la conduite ($\rho_g^{(1)} = \rho_g^{(2)} = \rho_{g,0}$), la conservation du débit du gaz dans la conduite permet d'écrire :

$$\dot{m}_g^{(1)} = \dot{m}_g^{(2)} \implies V_g^{(1)} = V_g^{(2)} = \frac{\dot{m}_g^{(1)}}{\rho_{g,0}} \quad (5.16)$$

En utilisant (5.16) et l'hypothèse d'équilibre des vitesses entre le gaz et les particules en sortie de conduite, le bilan (5.15) se simplifie sous la forme :

$$\Delta p S = \dot{m}_p^{(1)} (V_g^{(1)} - V_p^{(1)}) \quad (5.17)$$

où la seule inconnue est Δp .

Les simulations ont été effectuées avec les paramètres numériques présentés dans le [Tableau 5.12](#) concernant le gaz et les particules. La taille du domaine retenue est de $L = 10m$ et $S = 0.04m^2$. Les conditions limites sur les parois horizontales sont du type paroi glissante.

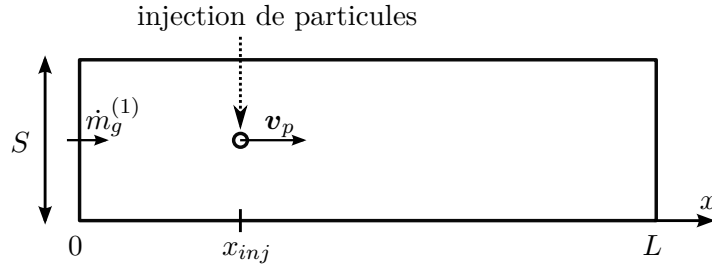


FIGURE 5.12 – Configuration du cas test de la perte de charge dans un écoulement chargé en particules.

Gaz			Particules		
$\rho_{0,g}$	1	$kg.m^{-3}$	ρ_p	1000	$kg.m^{-3}$
$c_{0,g}$	340	$m.s^{-1}$	d_p	10^{-4}	m
$p_{0,g}$	1013	hPa	$V_p^{(1)}$	1	$m.s^{-1}$
$\mu_{0,g}$	10^{-5}	$Pa.s$	$\dot{m}_p^{(1)}$	1	$kg.s^{-1}$
$\dot{m}_g^{(1)}$	0.4	$kg.s^{-1}$			

Tableau 5.12 – Propriétés du gaz et des particules utilisées pour les simulations concernant le cas test de la perte de charge dans un écoulement chargé en particules.

Résultats

L'évolution spatiale de chaque grandeur liée au gaz est représentée sur la Figure 5.13. Tout d'abord, nous pouvons observer que la variation de la densité du gaz dans la conduite n'est que de l'ordre de 0.15% donc l'hypothèse consistant à négliger les effets de compressibilité pour calculer la perte de charge de façon analytique est valide. Nous constatons également que la perte de charge a lieu en aval du point d'injection des particules dans la zone où les particules sont accélérées par l'écoulement gazeux. La valeur du saut de pression Δp obtenue par la simulation correspond bien à celle calculée analytiquement, c'est à dire $\Delta p = 225 Pa$.

D'après la conservation du débit de gaz, le terme $\rho_g V_g$ doit être constant dans la conduite. Numériquement, on observe que $\rho_g V_g$ varie sensiblement dans la zone où a lieu la perte de charge, c'est-à-dire où le gradient de pression est non-nul. Ce résultat s'explique par le fait que le schéma bas-Mach (§2.2.4.2), utilisé pour résoudre les équations du gaz, est basé sur l'ajout d'un terme de décentrement proportionnel au gradient de pression local dans l'expression de la vitesse convective du flux convectif. Pour rappel, cette vitesse convective V^* peut être définie localement par $V^* = (V_g - \gamma h \nabla p)$ où γ est proportionnel au pas de temps et h est le pas d'espace du maillage. Dans le cas où on fait tendre le pas de temps vers zéro, le terme correctif s'annule et on obtient $V^* = V_g$ ce qui garantit la consistance du schéma bas-Mach. En pratique, cela a été validé à travers l'étude de la convergence temporelle du schéma bas-Mach. Sur la Figure 5.14, on peut observer que plus le pas de temps de simulation diminue, plus $\rho_g V_g$ tend vers la valeur analytique qui est constante.

5.3 Conclusion du chapitre

Pour plusieurs cas académiques pour lesquels existent des solutions de référence, nous avons montré que le modèle bifluide et le modèle de spray permettent d'obtenir une solution précise. Ce travail de validation a permis de s'assurer que les modèles et méthodes numériques retenus ont la capacité de reproduire correctement les mécanismes physiques élémentaires mis

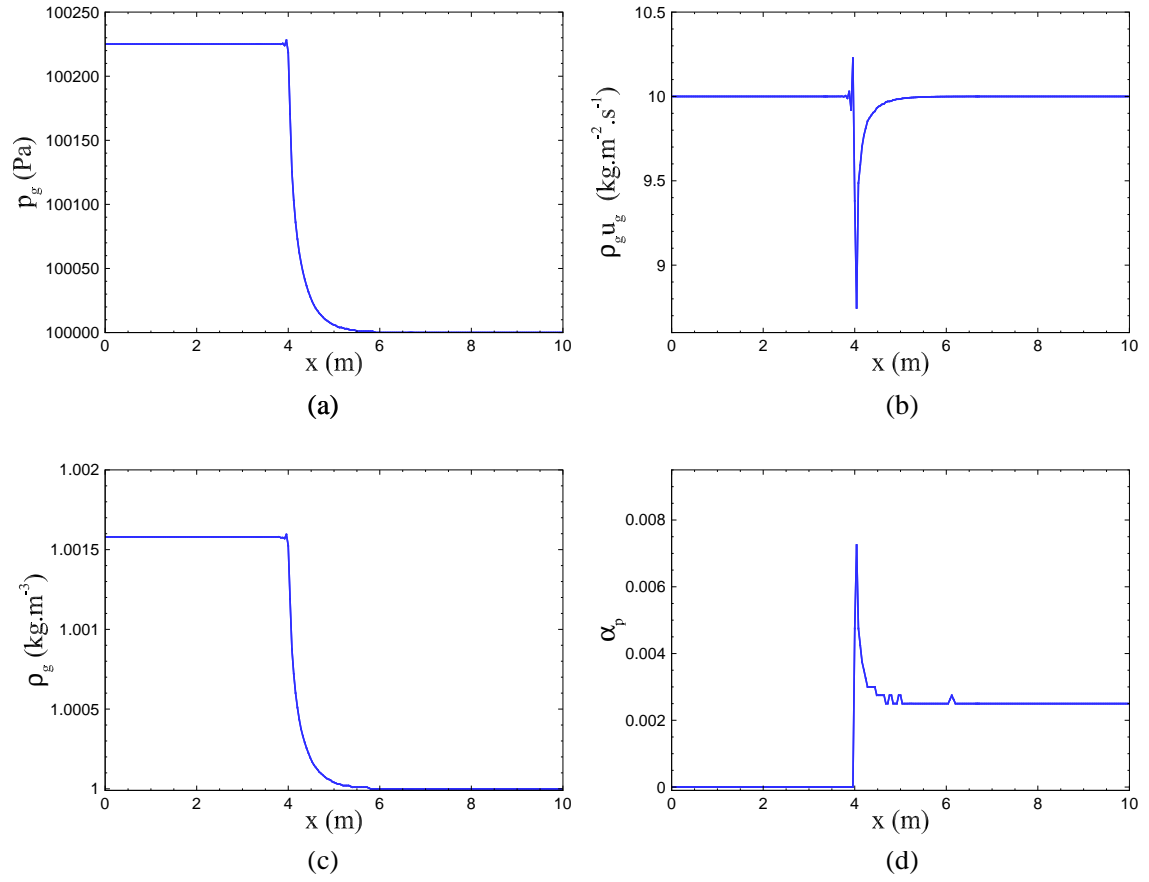


FIGURE 5.13 – Simulation de la perte de charge ($\Delta t = 8 \times 10^{-4} s$). Évolution des grandeurs en fonction de la position dans la conduite : (a) pression du gaz, (b) flux de quantité de mouvement du gaz, (c) densité du gaz, (d) fraction volumique du chargement en particules.

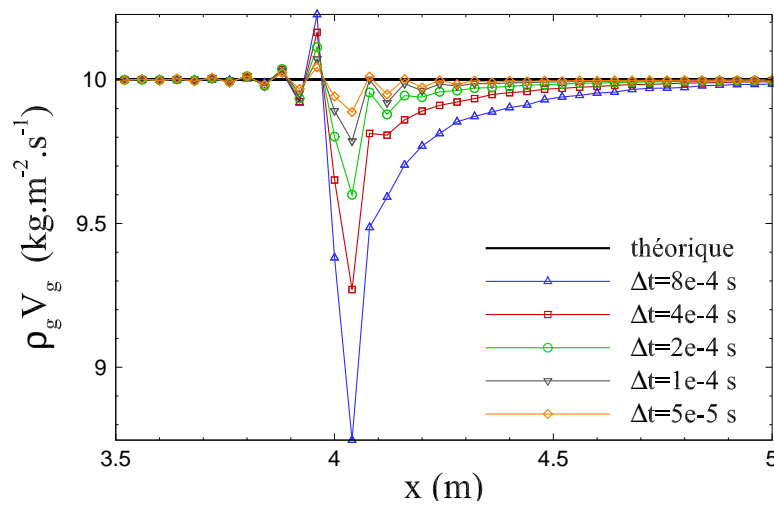


FIGURE 5.14 – Étude de la convergence temporelle du schéma bas-Mach pour la simulation de la perte de charge dans un écoulement chargé en particules.

en jeu dans le processus d'atomisation.

Chapitre 6

Méthodologie de couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray

Sommaire

6.1	Principe de la méthode de couplage	119
6.2	Notations	121
6.3	Vue d'ensemble du système d'équations couplées	121
6.4	Modèle d'atomisation	123
6.4.1	Formulation continue	123
6.4.1.1	Expression du terme $\mathbf{s}_{s \rightarrow a}$	123
6.4.1.2	Expression du terme $\mathbf{s}_{d \rightarrow a}$ et principe d'injection des gouttes dans le modèle de spray	128
6.4.1.3	Suppression du liquide dans le modèle bifluide	129
6.5	Modèle de ré-impact de gouttes	130
6.5.1	Les principales difficultés	131
6.5.2	Formulation continue	131
6.5.2.1	Expression du terme $\mathbf{s}_{d \rightarrow r}$	132
6.5.2.2	Expression du terme source $\mathbf{s}_{s \rightarrow r}$	137
6.5.2.3	Injection du liquide dans le modèle bifluide	137
6.5.2.4	Expression du flux de redistribution \mathcal{F}_r	138
6.6	Discrétisation et implémentation numérique dans le code SLOSH	139
6.6.1	Algorithme de couplage	139
6.6.2	Discrétisation du modèle d'atomisation	139
6.6.3	Discrétisation du modèle de ré-impact	142
6.7	Cas de validation pour le modèle de ré-impact	146
6.7.1	Configuration	146
6.7.2	Résultats	147
6.8	Conclusion du chapitre	148

6.1 Principe de la méthode de couplage

La méthodologie de couplage entre le modèle bifluide (cf. chapitre §2) et le modèle de spray (cf. chapitre §3) a pour objectif de construire un outil de simulation numérique capable

de décrire l'ensemble des échelles caractéristiques du processus d'atomisation d'une nappe liquide cisailée par un écoulement gazeux à forte vitesse. Pour cela, le modèle bifluide est utilisé pour la description du cœur liquide de la nappe dans une zone proche de l'injecteur et le modèle de spray est utilisé pour la description du spray issu de la pulvérisation du cœur liquide en aval de l'injecteur. Ce chapitre concerne les étapes nécessaires au couplage entre ces deux modèles.

Comme le modèle bifluide et le modèle de spray sont adaptés à la description de la phase liquide pour des gammes d'échelles spatiales différentes, il est nécessaire d'introduire des modèles de couplage permettant le transfert et la compatibilité des informations entre les différentes échelles. En pratique, on introduit deux modèles de couplage à travers lesquels le modèle bifluide et le modèle de spray seront indirectement couplés (voir Figure 6.1) :

- ▷ **un modèle d'atomisation du cœur liquide**, qui assure le transfert des informations résolues par le modèle bifluide vers le modèle de spray. Celui-ci permet d'accumuler localement les quantités liées au liquide prélevé dans le modèle bifluide jusqu'à ce que la masse de liquide cumulée soit suffisamment grande pour être réinjectée dans le modèle de spray sous forme de particules numériques de masse $m_p^{(num)}$ fixée.
- ▷ **un modèle de ré-impact de gouttes**, qui assure le transfert des informations résolues par le modèle de spray vers le modèle bifluide. Il permet d'accumuler les quantités liées aux particules numériques ré-impactantes et de relaxer l'injection de ces quantités dans le modèle bifluide (en introduisant notamment un temps caractéristique de ré-impact), l'objectif étant de garantir la robustesse des schémas numériques.

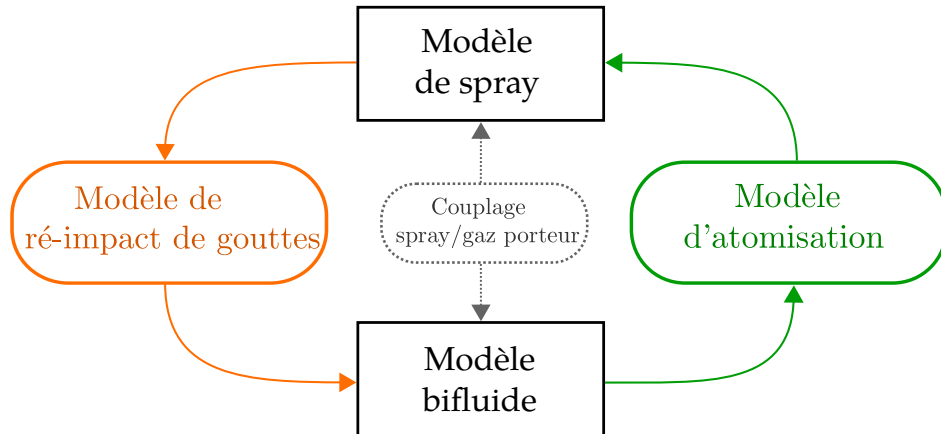


FIGURE 6.1 – Vue schématique de la méthodologie de couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray à travers un modèle d'atomisation et un modèle de ré-impact.

Ainsi, chaque modèle de couplage est basé sur l'introduction d'un nouveau jeu de variables qui lui est propre. Ces variables intermédiaires doivent emmagasiner toutes les informations nécessaires au transfert bidirectionnel du liquide entre le modèle bifluide et le modèle de spray. Les variables des modèles de couplage sont régies par des équations de conservation faisant intervenir des termes d'échange avec les modèles à coupler.

Dans la zone d'atomisation primaire toutes les échelles du phénomène sont potentiellement présentes. De plus, la longueur à laquelle le cœur liquide cesse d'exister comme corps continu (c'est-à-dire la longueur de rupture du cœur liquide) est fonction des paramètres amonts d'injection. En conséquence, le couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray peut potentiellement avoir lieu dans n'importe quelle zone du domaine physique au cours de la simulation. De ce fait, l'approche retenue pour la méthodologie de couplage suppose que le modèle bifluide et le modèle de spray coexistent dans tout le domaine physique. La définition

des zones appropriées pour le couplage est relativement complexe. En pratique, elle est basée à la fois sur des considérations physiques et des considérations numériques qui seront spécifiques à chacun des modèles de couplage.

Dans la suite de ce chapitre, nous décrivons les conventions de notations utilisées pour l'écriture des modèles de couplage. Ensuite, nous présentons successivement l'ensemble des variables et des équations de couplage associées au modèle d'atomisation et au modèle de ré-impact.

6.2 Notations

Par convention, toutes les grandeurs introduites dans les paragraphes suivants seront indicées selon le nom du modèle dans lequel elles interviennent (voir [Tableau 6.1](#)). Pour les variables déjà introduites dans les chapitres §2 et §3, les indices seront conservés dans la mesure où il n'y pas d'ambiguïté à lever (ces indices sont rappelés entre parenthèses dans le tableau [Tableau 6.1](#))

Noms des modèles	indices des grandeurs associées
modèle à phases s éparées	$s, (l=\text{liquide}, g=\text{gaz})$
modèle à phase d ispersée	$d, (p=\text{particule numérique})$
modèle d' a tomisation	a
modèle de r é-impact	r

Tableau 6.1 – Convention de notation pour les indices des variables utilisées dans chaque modèle.

|| Un terme de couplage s entre le modèle a et le modèle b sera noté $s_{a \rightarrow b}$ dans les équations du modèle b et sera noté $s_{b \rightarrow a}$ dans les équations du modèle a . À noter que dans le cas où le couplage est conservatif, on a la relation : $s_{b \rightarrow a} = -s_{a \rightarrow b}$.

6.3 Vue d'ensemble du système d'équations couplées

Avant de décrire successivement les équations qui forment le modèle d'atomisation (cf. §6.4) et le modèle de ré-impact (cf. §6.5), on représente l'ensemble de ces systèmes d'équations sur le schéma de la [Figure 6.2](#) afin d'offrir une vue d'ensemble de la méthodologie de couplage. Ce schéma montre notamment comment les différents termes de couplages liés au modèle d'atomisation et au modèle de ré-impact permettent un couplage indirect entre le modèle bifluide et le modèle de spray.

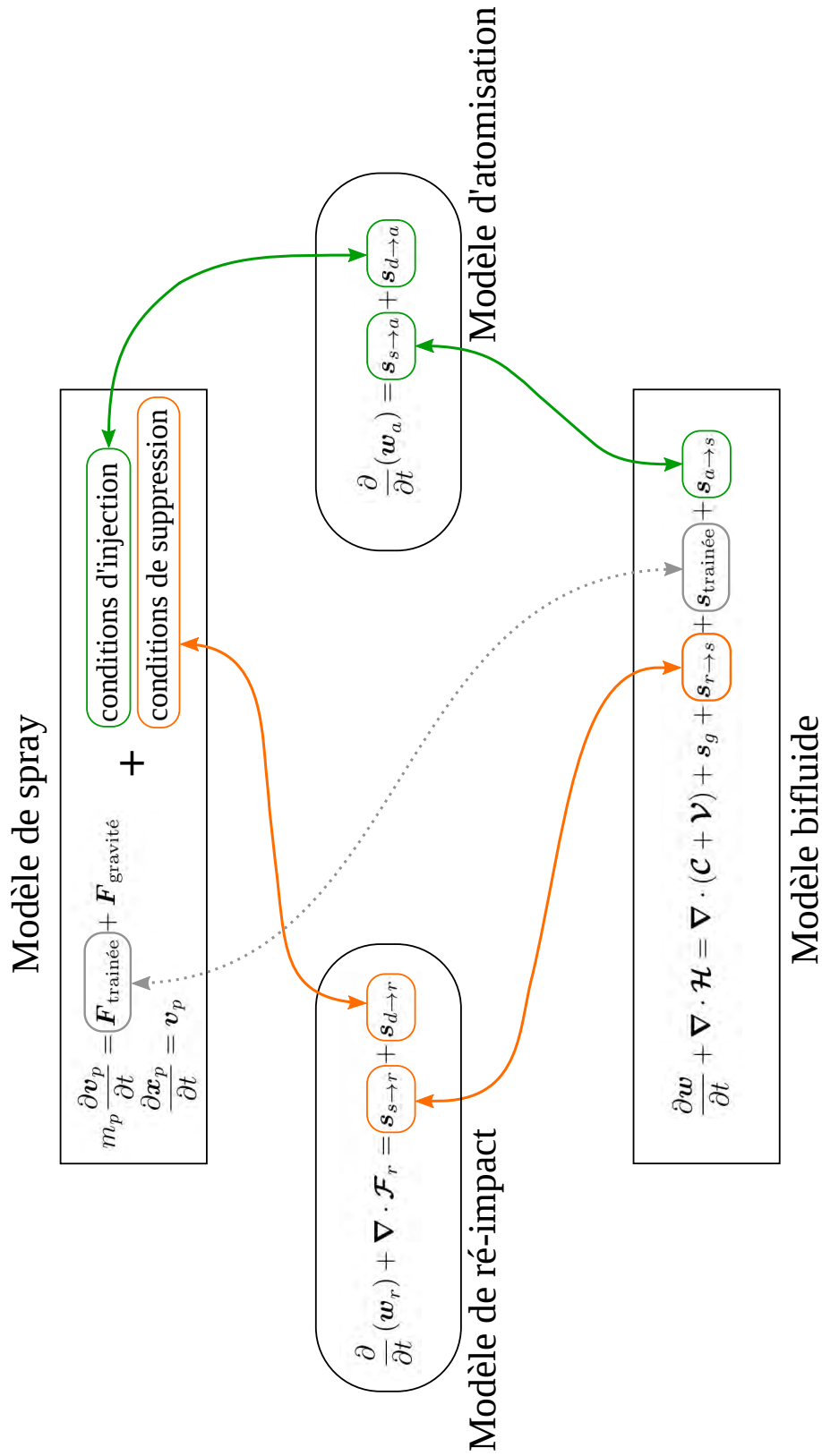


FIGURE 6.2 – Vue globale du couplage des équations du modèle bifluide et du modèle de spray à travers les équations d'un modèle d'atomisation et d'un modèle de ré-impact. Les flèches désignent les termes de couplage entre deux modèles.

6.4 Modèle d'atomisation

Le modèle d'atomisation assure le transfert local de la masse liquide résolue par le modèle bifluide vers le modèle de spray en réinjectant cette masse liquide sous forme de particules numériques. Comme chaque particule numérique représente une masse liquide $m_p^{(num)}$ qui est finie et fixée¹, le modèle d'atomisation doit accumuler la masse et la quantité de mouvement du liquide prélevées localement dans le modèle bifluide.

Les entrées du modèle d'atomisation sont donc les champs eulériens résolus par le modèle bifluide ainsi qu'un jeu de paramètres d'entrée qui sera précisé au cours de la description du modèle. En sortie, le modèle d'atomisation fournit au modèle de spray le nombre de gouttes liquides créées localement par atomisation ainsi que les caractéristiques de ces gouttes, c'est-à-dire leur taille et leur vitesse initiale.

6.4.1 Formulation continue

La mise en équation du modèle d'atomisation est effectuée en introduisant un nouveau jeu d'équations portant sur les variables \mathbf{w}_a liées au modèle d'atomisation :

$$\mathbf{w}_a = {}^t(\rho_a, \rho_a \mathbf{v}_a) \quad (6.1)$$

Les quantités ρ_a et $\rho_a \mathbf{v}_a$ désignent respectivement la densité volumique de masse de liquide à atomiser et la quantité de mouvement du liquide associée à la masse de liquide à atomiser.

Le système d'équations issu du bilan de conservation de la masse et de la quantité de mouvement du liquide à atomiser s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}_a) = \mathbf{s}_{s \rightarrow a} + \mathbf{s}_{d \rightarrow a} \quad (6.2)$$

où $\mathbf{s}_{s \rightarrow a} = {}^t(s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a)}, s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)})$ désigne le terme source volumique modélisant les termes d'échanges depuis le modèle bifluide vers le modèle d'atomisation, et $\mathbf{s}_{d \rightarrow a} = {}^t(s_{d \rightarrow a}^{(\rho_a)}, s_{d \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)})$ désigne le terme source volumique modélisant les termes d'échanges depuis le modèle de spray vers le modèle d'atomisation. Les raisonnements conduisant à la formulation de ces deux termes sources sont décrits aux paragraphes suivants.

Remarque 5

À noter qu'il n'existe pas de terme source associé à une équation d'énergie puisque, dans le cadre de ces travaux, celle-ci n'a pas été prise en compte dans le modèle bifluide et le modèle de spray.

6.4.1.1 Expression du terme $\mathbf{s}_{s \rightarrow a}$

Le terme source $s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a)}$ représente un débit volumique de masse de liquide atomisée. On pose :

$$s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a)} = \tilde{\rho}_l \nu_a \mathcal{R}_a \quad (6.3)$$

où $\tilde{\rho}_l$ est la densité volumique de masse du liquide du modèle bifluide, ν_a est la fréquence d'atomisation (c'est-à-dire l'inverse du temps caractéristique d'atomisation τ_a) et \mathcal{R}_a est un terme permettant de contrôler les zones d'activation du modèle d'atomisation selon des critères numériques.

1. On rappelle que $m_p^{(num)}$ est un paramètre d'entrée du code qui contrôle la discrétisation en masse du spray, ou autrement dit, le nombre de particules numériques utilisées pour représenter l'ensemble du spray.

Fréquence d'atomisation ν_a

Le terme ν_a est essentiel puisqu'il pilote directement le taux de transfert local de la phase liquide entre le modèle bifluide et le modèle d'atomisation, et donc le taux de production de gouttes. À notre connaissance, il n'existe pas d'étude théorique ou expérimentale ayant proposé une formulation permettant de calculer la fréquence d'atomisation car l'estimation de cette grandeur suppose d'avoir déjà identifié tous les mécanismes physiques en compétition à l'échelle locale. Pour cette raison, nous avons développé une formulation de la fréquence d'atomisation basée sur une analyse qualitative des mécanismes supposés entrer en jeu lors de la formation des gouttes. Il est également essentiel de noter que ce temps caractéristique d'atomisation doit être entièrement déterminé à partir des grandeurs résolues par le modèle bifluide.

La fréquence d'atomisation ν_a peut être liée à l'intensité du cisaillement par l'écoulement gazeux. Il est donc naturel de lier celle-ci à l'intensité du gradient de vitesse local en utilisant la norme de la vorticit  de l'écoulement (m me si ce choix n'est pas le seul envisageable). On pose alors :

$$\nu_a = \|\nabla \times \mathbf{v}\| \quad (6.4)$$

Remarque 6

Pour la d finition de la fr quence d'atomisation ν_a , une autre possibilit  est :

$$\tau_a \propto \|\mathbf{d}\| \quad (6.5)$$

o  \mathbf{d} est le tenseur des taux de d formations de l' coulement : $\mathbf{d} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + {}^t \nabla \mathbf{v})$.

Terme d'activation \mathcal{R}_a

Le mod le d'atomisation ne doit s'activer que dans les zones o  le mod le bifluide n'est pas capable de d crire correctement l' coulement diphasique, en particulier les zones o  l'interface num rique entre le gaz et le liquide est sous-r solue. Cette caract ristique est importante puisqu'elle permet d'assurer que dans le cas limite o  le maillage serait assez fin pour capturer toutes les  chelles de l' coulement, le mod le d'atomisation ne s'activerait pas pour produire des gouttes et toutes les structures liquides seraient mod lis es uniquement par le mod le bifluide (comme le ferait une simulation de type DNS). Pour satisfaire cette propri t , on d finit \mathcal{R}_a en fonction de la topologie locale de l'interface gaz-liquide r solue par le mod le bifluide :

$$\mathcal{R}_a = \max(0, \cos(\theta_a)) \chi_a(\alpha_l, \nabla \alpha_l) \quad (6.6)$$

o  θ_a d signe l'angle entre la normale   l'interface gaz/liquide et la direction de la vitesse locale de l' coulement et o  χ_a est une fonction masque qui est non-nulle dans les zones o  on consid re l'interface comme sous-r solue.

La fonction masque χ_a est d finie par :

$$\chi_a(\alpha_l, \nabla \alpha_l) = \begin{cases} 1 & \alpha_l \leq \alpha_l^{atom.} \text{ et } \|\nabla \alpha_l\| \leq \|\nabla \alpha_l\|^{atom.} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.7)$$

o  $\alpha_l^{atom.}$ et $\|\nabla \alpha_l\|^{atom.}$ sont respectivement des valeurs seuils pour la fraction volumique de liquide et le gradient de la fraction volumique dans le mod le bifluide. Ces valeurs seuils sont des param tres d'entr e qu'il est n cessaire de d finir.

Pour le seuil sur la fraction volumique, la valeur $\alpha_l^{atom.} = 0.05$ conduit à un compromis acceptable pour les applications visées : celle-ci est ni trop faible (pour ne pas trop s'éloigner du domaine de validité du modèle bifluide), ni trop importante (pour préserver le cœur liquide et n'autoriser la production de gouttes que dans les zones où l'écoulement est suffisamment dilué).

En ce qui concerne la valeur de $\|\nabla \alpha_l\|$ du modèle bifluide, celle-ci est liée à l'épaisseur de l'interface δ_{int} par la relation suivante :

$$\delta_{int} \approx \frac{1}{\|\nabla \alpha_l\|} \quad (6.8)$$

Une valeur de $\|\nabla \alpha_l\|$ faible correspond donc à un étalement excessif de l'interface. En pratique, on considère que l'interface est bien résolue si son épaisseur d'étalement δ_{int} est petite devant un multiple fini du pas de maillage local Δx et devant la taille caractéristique du cœur liquide, ici son épaisseur e_{nappe} . Ceci se traduit par la condition suivante :

$$\delta_{int} \leq \min(C_1 e_{nappe}, C_2 \Delta x) \quad (6.9)$$

où C_1 et C_2 sont des constantes dont les valeurs sont à définir. En pratique, on prend $C_1 = 1$ et $C_2 = 10$. En utilisant la relation (6.8), l'inégalité (6.9) devient :

$$\|\nabla \alpha_l\| \geq \max\left(\frac{1}{C_1 e_{nappe}}, \frac{1}{C_2 \Delta x}\right) \quad (6.10)$$

À partir de la relation (6.10), on déduit l'expression de la valeur $\|\nabla \alpha_l\|^{atom.}$ en dessous de laquelle l'interface est considérée comme sous-résolue :

$$\|\nabla \alpha_l\|^{atom.} = \max\left(\frac{1}{C_1 e_{nappe}}, \frac{1}{C_2 \Delta x}\right) \quad (6.11)$$

Sur la Figure 6.3, nous avons représenté l'évolution des deux termes dont dépend la fonction masque χ_a . La combinaison du critère sur la fraction volumique de liquide α_l et sur la norme du gradient de la fraction volumique de liquide $\|\nabla \alpha_l\|$ permet d'identifier correctement les zones d'étalement excessives de l'interface situées à l'extérieur du cœur liquide.

En ce qui concerne l'angle θ_a entre la normale à l'interface gaz/liquide et la direction de la vitesse locale de l'écoulement, celui-ci est défini par :

$$\nabla \alpha_l \cdot \mathbf{v} = \cos(\theta_a) \|\nabla \alpha_l\| \|\mathbf{v}\| \quad (6.12)$$

L'utilisation de l'angle θ_a dans le terme source permet de prendre en compte l'influence de la géométrie de l'interface vis-à-vis de l'écoulement. En particulier, sur la Figure 6.4, on a schématisé trois scénarios possibles pour l'interface gaz-liquide dans l'écoulement gazeux :

- (a) La normale à l'interface est perpendiculaire à la vitesse locale de l'écoulement. Ce cas correspond typiquement aux situations où l'interface est cisailée par l'écoulement gazeux, ce qui peut conduire à l'arrachement de gouttes. Des visualisations expérimentales [27] ont montré que l'arrachement de gouttes à partir du cœur liquide (ou "pelage" du cœur liquide) est quasiment inexistant pour les régimes d'atomisation étudiés. On souhaite donc limiter la production de gouttes dans les zones correspondant à ce scénario.

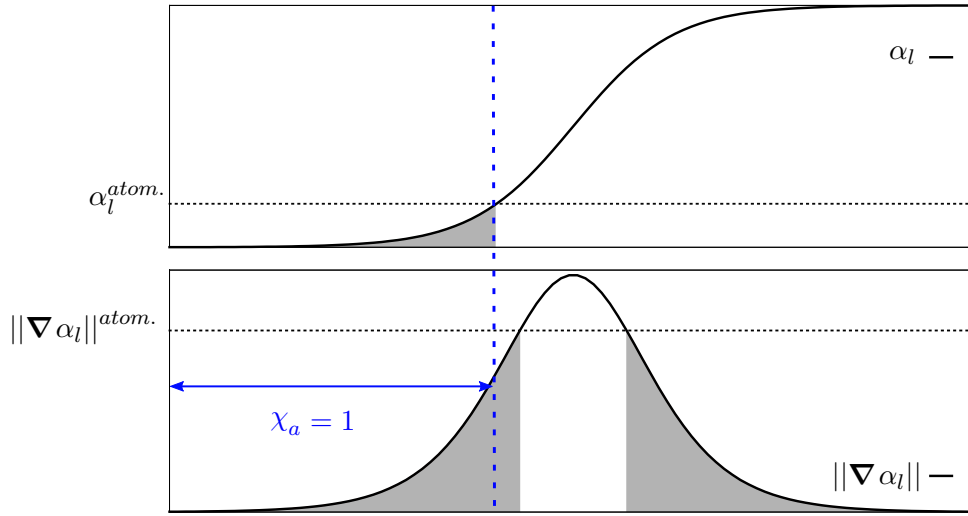


FIGURE 6.3 – Définition de la fonction masque χ_a pour le modèle d'atomisation. La zone grisée représente la zone où l'atomisation est autorisée par chacun des termes de l'expression (6.7)

- (b) La normale à l'interface est alignée avec la vitesse locale de l'écoulement et dans le même sens. Cette configuration correspond au cas où des paquets liquides sont étirés jusqu'à la rupture en petits amas liquides. Ce scénario est celui privilégié d'après les observations expérimentales.
- (c) La normale à l'interface est alignée avec la vitesse locale de l'écoulement et dans le sens inverse. Pour ce cas, on ne souhaite pas produire de gouttes car celles-ci seraient vouées à ré-impacter le cœur liquide.

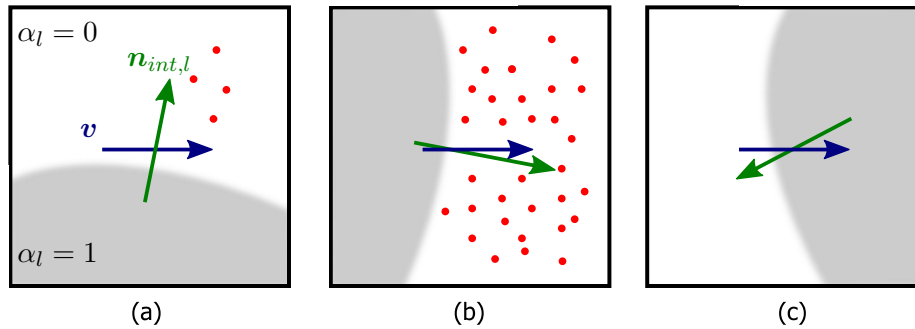


FIGURE 6.4 – Identification des scénarios d'atomisation selon l'angle θ_a entre la normale à l'interface et la vitesse locale à l'écoulement.

Remarque 7

La prise en compte de l'angle θ_a est basée sur des considérations purement phénoménologiques qui sont issues d'observations spécifiques faites dans le cas de nappes liquides cisailées. Il est tout à fait possible d'adapter la dépendance de la fonction masque par rapport à l'angle θ_a dans le cas où l'on souhaite modéliser d'autres phénomènes physiques.

On pense notamment au cas où on souhaite prendre en compte l'atomisation par arrachement/pelage qui est très importante dans le cas de l'atomisation dans les chambres de combustion cryotechnique (banc MASCOTTE de l'ONERA [99]).

Définition de $s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)}$

Le terme source $s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)}$ représente le débit de flux de quantité de mouvement associé au débit de masse de liquide atomisée $s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a)}$. Ce terme source $s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)}$ est défini par :

$$s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)} = s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a)} \mathbf{v}_l \quad (6.13)$$

ou encore :

$$s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)} = \frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \mathbf{v}_l \quad (6.14)$$

où \mathbf{v}_l est la vitesse locale de la phase liquide estimée à partir des grandeurs résolues par le modèle bifluide. En pratique, on définit la vitesse \mathbf{v}_l comme étant égale à la vitesse du pseudo-mélange issue du modèle bifluide :

$$\mathbf{v}_l = \mathbf{v} \quad (6.15)$$

L'estimation de la vitesse du liquide à partir de (6.15) suppose que la vitesse locale du pseudo-mélange représente principalement celle du liquide. Compte-tenu de l'expression de la vitesse du mélange (2.4), cette condition est vérifiée si localement la masse de gaz est négligeable devant la masse de liquide :

$$\tilde{\rho}_l \gg \tilde{\rho}_g \quad (6.16)$$

ce qui entraîne :

$$\alpha_l \gg \frac{1}{1 + \frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (6.17)$$

Pour les applications étudiées, l'application numérique de la condition (6.17) implique que l'on doive choisir la valeur seuil $\alpha_l^{atom.}$ telle que $\alpha_l^{atom.} \gg 10^{-3}$. En pratique, cette condition est donc vérifiée si on adopte la valeur préconisée plus haut.

Remarque 8

Le modèle bifluide est un modèle à une vitesse qui suppose que la vitesse du liquide et la vitesse du gaz sont identiques localement. Dans le cas où on autorise l'interface à être très diffusée dans une zone de fort cisaillement, l'hypothèse de non-glissement local entre les deux fluides peut conduire à des erreurs assez importantes lors de l'estimation de la vitesse liquide \mathbf{v}_l à partir de (6.15). Ces erreurs entraînent une mauvaise prédiction de la vitesse initiale d'injection des gouttes par le modèle d'atomisation. Pour remédier à cela, il peut être envisagé de reconstruire à posteriori une vitesse de glissement entre les deux fluides du modèle bifluide en développant des méthodes basées sur des convolutions ou des extensions de vitesses [86]. Cette estimation de la vitesse de glissement pourrait alors servir à corriger la valeur de la vitesse initiale d'injection des gouttes prédite par le modèle d'atomisation.

6.4.1.2 Expression du terme $s_{d \rightarrow a}$ et principe d'injection des gouttes dans le modèle de spray

Le transfert du liquide entre le modèle d'atomisation et le modèle de spray est défini de manière conservative, on a donc :

$$s_{a \rightarrow d} = -s_{d \rightarrow a} \quad (6.18)$$

En l'absence de contraintes liées ici au caractère discret de la méthode numérique particulière utilisée pour la modélisation du spray, on pourrait simplement poser :

$$s_{d \rightarrow a} = -s_{s \rightarrow a} \quad (6.19)$$

Dans ce cas on aurait à chaque instant $\mathbf{w}_a = 0$ (si à l'instant initial $\mathbf{w}_a = 0$) et l'introduction de la variable \mathbf{w}_a serait superflue.

Dans le cas présent, du fait de l'utilisation d'une méthode particulière, le spray correspond numériquement à un ensemble de particules numériques représentant chacune une masse *finie* de liquide. Lorsque le taux de production local de gouttes est faible, il peut alors être nécessaire de "stocker" momentanément les gouttes produites avant de les injecter dans le modèle de spray : c'est le rôle du modèle d'atomisation. On a donc formellement :

$$s_{d \rightarrow a} = \mathcal{L}(-s_{s \rightarrow a}) \quad (6.20)$$

où \mathcal{L} est un opérateur de "retard" qui est fonction de certains paramètres numériques, comme notamment la masse des particules numériques $m_p^{(num)}$ et la valeur du pas de temps Δt .

Le nombre de particules numériques injectées $N_{p,inj}$, dans une cellule Ω_i au cours du pas de temps $[t^n, t^{n+1}]$, est défini comme le plus grand entier vérifiant l'inégalité suivante :

$$m_a - N_{p,inj}|_i m_p^{(num)} \geq 0 \quad (6.21)$$

où m_a est la masse totale de liquide atomisé présente dans la cellule Ω_i à l'instant t^{n+1} :

$$m_a = \int_{\Omega_i} \rho_a(t^{n+1}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (6.22)$$

On pose alors par définition :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega_i, \quad \begin{cases} s_{d \rightarrow a}^{(\rho_a)}(t, \mathbf{x}) = -\frac{1}{|\Omega_i|} N_{p,inj}|_i m_p^{(num)} \delta(t - t^{n+1}) \\ s_{d \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)}(t, \mathbf{x}) = -\frac{1}{|\Omega_i|} N_{p,inj}|_i m_p^{(num)} \mathbf{v}_a \delta(t - t^{n+1}) \end{cases} \quad (6.23)$$

$$(6.24)$$

Conditions d'injection des gouttes

À partir de la définition du terme source $s_{d \rightarrow a}$, on définit les conditions d'injection des gouttes dans le modèle de spray permettant de satisfaire la contrainte de conservation du liquide (6.19). Pour une cellule Ω_i , on a :

- ▷ Le nombre de particules numériques injectées est $N_{p,inj}|_i$.
- ▷ La vitesse d'injection des gouttes est : $\mathbf{v}_{p,inj} = \mathbf{v}_a$
- ▷ La position initiale des particules numériques injectées est tirée aléatoirement dans la cellule Ω_i .
- ▷ La densité du liquide constituant les gouttes est donnée par : $\rho_{p,inj} = \rho_l$

Tailles des gouttes

Pour chaque particule numérique, la taille des gouttes est déterminée à partir d'un tirage aléatoire du diamètre des gouttes selon une loi de distribution en volume qui est pré-supposée. Cette loi de distribution, notée $f_{V_p}(\mathcal{P})$, dépend d'un ensemble de paramètres \mathcal{P} . Dans le cas d'une loi log-normale, les paramètres de \mathcal{P} sont par exemple le diamètre moyen $d_{p,m}$ et l'écart type σ_p . Idéalement, ces paramètres doivent être déterminés localement à partir des caractéristiques de l'écoulement résolu par le modèle bifluide et par des corrélations issues de travaux expérimentaux ou de simulations DNS permettant de relier le comportement macroscopique d'une nappe liquide (fréquence de battement, longueur de rupture, amplitude de battement,...) à une distribution de tailles de gouttes.

Dans ces travaux, les paramètres de la loi de distribution sont actuellement une donnée d'entrée du modèle car nous ne disposons pas de corrélations fiables pour le cas de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée. À l'heure actuelle, ceci est la principale limitation du modèle d'atomisation qu'il reste à lever pour obtenir une méthodologie de couplage capable d'estimer toutes les caractéristiques des gouttes créées par le processus d'atomisation du cœur liquide.

6.4.1.3 Suppression du liquide dans le modèle bifluide

Le transfert du liquide depuis le modèle bifluide vers le modèle d'atomisation implique la suppression des quantités liées aux liquides atomisés grâce à un terme source $s_{a \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_l)}$ dans l'équation (2.11) de transport de la masse liquide et d'un terme source $s_{a \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})}$ dans l'équation (2.16) de quantité de mouvement du mélange. Pour assurer le bilan de conservation global de la masse et de la quantité de mouvement associées à la phase liquide, ces termes sources ont pour expressions :

$$s_{a \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_l)} = -s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a)} \quad (6.25)$$

$$s_{a \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})} = -s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a \mathbf{v}_a)} \quad (6.26)$$

ou encore :

$$s_{a \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_l)} = -\frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \quad (6.27)$$

$$s_{a \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})} = -\frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \mathbf{v}_L \quad (6.28)$$

Compensation du volume occupé par les gouttes et préservation de la pression :

Dans le modèle bifluide, le volume occupé par les gouttes n'est pas pris en compte dans l'équation de conservation de la masse de la phase gazeuse ainsi que dans l'équation de quantité de mouvement. La présence des gouttes ne se traduit que par la présence d'un terme source d'échange de quantité de mouvement $\mathbf{s}_{trainée}$. Ainsi, tout se passe comme si les gouttes étaient supposées ponctuelles. De ce fait, le prélèvement d'un volume de liquide dans le modèle bifluide entraîne localement un "vide" qui, si rien n'est fait, est automatiquement comblé par la phase gazeuse. Le comblement de ce volume par le gaz peut mener localement à une chute de pression relativement importante dans le cas où le celui-ci est important (le taux de "vide" maximal qui peut être créé est directement contrôlé par le paramètre α_l^{atom}). Pour pallier ce problème, on impose la contrainte suivante : le transfert du liquide doit être fait à pression constante. Pour des fluides barotropes, cette contrainte s'écrit :

$$dp_l = dp_g = 0 \Leftrightarrow d\rho_l = d\rho_g = 0 \quad (6.29)$$

Pour les densités volumiques de masse, on obtient :

$$d\tilde{\rho}_l = \alpha_l d\rho_l + \rho_l d\alpha_l = \rho_l d\alpha_l \quad (6.30)$$

$$d\tilde{\rho}_g = \rho_g d\alpha_g = \rho_g d(1 - \alpha_l) = -\rho_g d\alpha_l \quad (6.31)$$

Ou encore :

$$d\tilde{\rho}_g = -\frac{\rho_g}{\rho_l} d\tilde{\rho}_l \quad (6.32)$$

Dans le cas de l'atomisation, on a $d\tilde{\rho}_l < 0$.

L'équation (6.32) traduit le fait que l'ajout d'un terme source dans l'équation de la masse du liquide du modèle bifluide doit conduire à l'ajout d'un terme source de signe opposé dans l'équation du gaz afin de respecter la contrainte (6.29). L'expression du terme source dans l'équation du gaz est :

$$s_{a \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_g)} = -\frac{\rho_g}{\rho_l} s_{a \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_l)} = \frac{\rho_g}{\rho_l} s_{s \rightarrow a}^{(\rho_a)} \quad (6.33)$$

c'est-à-dire :

$$s_{a \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_g)} = \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \quad (6.34)$$

La masse totale de la phase gaz ne sera donc pas exactement conservée lors du couplage. Toutefois, la quantité de masse de gaz ajoutée pour compenser le volume de liquide prélevé est globalement négligeable compte tenu du fait que pour les injecteurs aéronautiques, on vérifie que :

- ▷ le débit volumique total de liquide injecté est faible par rapport au débit volumique total de gaz injecté (rapport situé entre 1/10000 et 1/1000).
- ▷ le débit volumique de gaz ajouté pour la préservation de la pression est égal au débit volumique de liquide injecté.

En d'autres termes, le débit massique de gaz ajouté pour compenser le "vide" est globalement négligeable devant le débit massique de gaz injecté par un injecteur aéronautique.

Pour tenir compte du gain de quantité de mouvement associé à l'ajout de gaz, on adapte également le terme $s_{a \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})}$ de couplage initialement défini par (6.28) :

$$s_{a \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})} = -\left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_l}\right) \frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \mathbf{v}_L \quad (6.35)$$

6.5 Modèle de ré-impact de gouttes

La modélisation de l'impact de gouttes a pour objectif de pouvoir simuler numériquement deux configurations :

- ▷ la formation de films minces lors de l'impact de gouttes sur une paroi.
- ▷ le ré-impact de gouttes sur une nappe liquide.

D'un point de vue numérique, il s'agit de définir le modèle et l'algorithme permettant de transférer les quantités liées aux gouttes résolues par le modèle de spray vers le modèle eulérien bifluide (traitant le liquide comme une phase continue).

6.5.1 Les principales difficultés

La première difficulté pour la modélisation du ré-impact des gouttes sur le cœur liquide provient du fait que le modèle bifluide est basé sur un formalisme à interface diffuse. De ce fait, la surface d'impact entre une goutte et le cœur liquide n'est pas clairement définie puisque l'interface est une zone de transition continue entre la phase liquide et la phase gazeuse. Pour surmonter cette difficulté, nous introduisons un critère de détection d'impact qui, combiné à une étape de redistribution du liquide impactant, permet d'obtenir un modèle de ré-impact compatible avec un formalisme à interface diffuse.

La seconde difficulté pour le couplage est liée au fait que la phase liquide qui n'occupe aucun volume dans le champ gazeux pour le modèle de spray (car les gouttes sont supposées ponctuelles) va "brutalement" occuper un certain volume lors du transfert vers le modèle bifluide. Ainsi, le transfert de la masse de la phase liquide depuis le modèle de spray vers le modèle bifluide peut induire localement de fortes surpressions pouvant conduire à la déstabilisation des méthodes numériques. Pour pallier ce problème, on impose la contrainte que le couplage soit fait à pression constante comme cela a été fait avec le modèle d'atomisation au paragraphe §6.4.1.3

Une difficulté supplémentaire est liée au fait que localement il est possible d'avoir $\alpha_l + \alpha_p > 1$ où α_p et α_l représentent respectivement la fraction volumique locale en gouttes et la fraction volumique de la phase liquide dans le modèle bifluide. De ce fait, il n'est pas possible d'injecter directement la masse des gouttes dans la phase liquide du modèle bifluide sans prendre quelques précautions. Cette difficulté est surmontée grâce à l'utilisation d'un terme de transport dans le modèle de ré-impact qui permet de transférer l'injection du liquide ré-impactant dans des zones adéquates vis-à-vis du modèle bifluide. Nous avons également introduit un temps caractéristique de ré-impact qui permet de relaxer l'injection des gouttes dans le modèle bifluide afin d'assurer la robustesse globale de la méthodologie.

6.5.2 Formulation continue

Le modèle de ré-impact est basé sur la mise en équation d'un nouvel ensemble de variables \mathbf{w}_r défini par :

$$\mathbf{w}_r = {}^t(\rho_r, \rho_r \nu_r, \rho_r \mathbf{v}_r) \quad (6.36)$$

où ρ_r , ν_r , \mathbf{v}_r représentent respectivement la masse volumique de liquide devant ré-impacter, la fréquence caractéristique de ré-impact, et la vitesse du liquide ré-impactant. La fréquence caractéristique de ré-impact ν_r est reliée au temps caractéristique de ré-impact τ_r par la relation :

$$\tau_r = \frac{1}{\nu_r} \quad (6.37)$$

Le système d'équations locales de conservation pour \mathbf{w}_r s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{w}_r) + \nabla \cdot \mathcal{F}_r = \mathbf{s}_{s \rightarrow r} + \mathbf{s}_{d \rightarrow r} \quad (6.38)$$

où :

- ▷ $\mathbf{s}_{d \rightarrow r} = {}^t \left(s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r)}, s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \nu_r)}, s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \mathbf{v}_r)} \right)$ est le terme source modélisant le transfert entre le modèle de spray et le modèle de ré-impact. Ce terme doit donc quantifier localement la quantité de gouttes qui ré-impactent ainsi que les caractéristiques des impacts (temps caractéristique et vitesse d'impact).
- ▷ $\mathbf{s}_{s \rightarrow r} = {}^t \left(s_{s \rightarrow r}^{(\rho_r)}, s_{s \rightarrow r}^{(\rho_r \nu_r)}, s_{s \rightarrow r}^{(\rho_r \mathbf{v}_r)} \right)$ est le terme source permettant le transfert du liquide entre le modèle bifluide et le modèle de ré-impact.
- ▷ \mathcal{F}_r est le flux de transport (redistribution) qui permet de gérer le cas singulier où on a localement $\alpha_l + \alpha_p > 1$.

6.5.2.1 Expression du terme $\mathbf{s}_{d \rightarrow r}$

Le ré-impact d'une particule numérique k sur une surface Σ (ici, la surface Σ est un terme générique qui désigne aussi bien l'interface entre les deux fluides ou une paroi du domaine physique) se traduit par une variation de son poids numérique $w_{p,k}$ selon l'équation suivante :

$$\frac{dw_{p,k}}{dt} = s_{p,k}^{imp.} \quad (6.39)$$

avec :

$$s_{p,k}^{imp.} = -w_{p,k} \delta(t - t_k^{imp.}) \quad (6.40)$$

où δ est la distribution de Dirac et $t_k^{imp.}$ est l'instant où a lieu l'impact de la particule k sur la surface Σ . L'équation (6.39) implique que la particule k "perde" toute sa masse au moment de l'impact, en d'autres termes elle n'existe plus après l'impact.

Le calcul du terme source $s_{p,k}^{imp.}$ à partir de (6.40) nécessite de connaître explicitement la valeur de $t_k^{imp.}$. Or, l'instant $t_k^{imp.}$ n'est pas clairement défini lorsqu'il s'agit d'un ré-impact sur une interface diffuse. Pour pallier ce problème, il est possible d'approximer le second membre de l'équation (6.39) afin d'obtenir une formulation qui soit compatible avec une formulation à interface diffuse et adaptée à une mise en œuvre numérique.

Approximation de $s_{p,k}^{imp.}$

Pour alléger les notations, l'indice k correspondant à la particule numérique considérée est volontairement omis dans la suite de ce paragraphe.

La première étape consiste à régulariser la distribution de Dirac intervenant dans la définition (6.40) du terme source $s_p^{imp.}$. On définit la fonction ϱ_ϵ telle que :

$$\epsilon > 0, \quad \varrho_\epsilon(t) = \frac{1}{\epsilon} \varrho\left(\frac{t}{\epsilon}\right) \quad (6.41)$$

où la fonction $\varrho \in C^\infty$ est strictement positive, à support compact et vérifie :

$$\int_{\mathbb{R}} \varrho(t) dt = 1 \quad (6.42)$$

Par construction, la fonction ϱ_ϵ converge au sens faible vers δ :

$$\varrho_\epsilon(t) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \delta(t) \quad (6.43)$$

La nouvelle expression du terme source $s_p^{imp.}$ obtenue avec la régularisation est :

$$s_p^{imp.} \stackrel{\text{rég.}}{=} -w_p \varrho_\epsilon(t - t^{imp.}) \quad (6.44)$$

$$= -\frac{w_p}{\epsilon} \varrho\left(\frac{t - t^{imp.}}{\epsilon}\right) \quad (6.45)$$

La seconde étape consiste alors à approximer le terme $(t - t^{imp.})$. Pour cela, on se place dans le cas 1D afin de simplifier le raisonnement (cf. Figure 6.5). On définit la distance $h(t)$

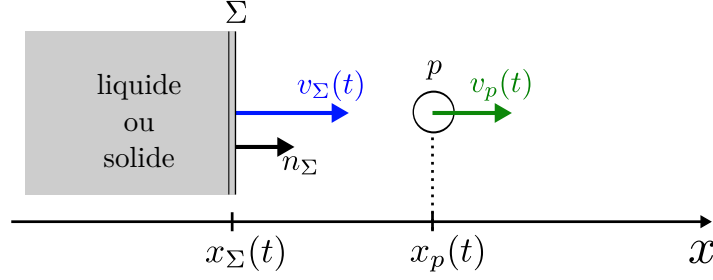


FIGURE 6.5 – Schéma 1D de la configuration correspondant au ré-impact d'une particule numérique p sur une surface Σ (la normale à l'interface \mathbf{n}_Σ est confondue avec l'axe x).

de la particule numérique à la surface Σ au cours du temps :

$$\forall t \leq t^{imp.}, \quad h(t) = x_p(t) - x_\Sigma(t) \quad (6.46)$$

S'il y a effectivement ré-impact, alors $t^{imp.}$ est une valeur finie et il existe un instant t_0 à partir duquel on a une diminution de la distance $h(t)$:

$$(\text{La particule numérique impacte } \Sigma) \Rightarrow \exists t_0 < t^{imp.} \mid \forall t \in [t_0, t^{imp.}], \quad h'(t) < 0 \quad (6.47)$$

En effectuant un développement limité en t au voisinage de $t^{imp.}$, on peut écrire :

$$h(t) \approx h(t^{imp.}) + h'(t) \times (t - t^{imp.}) \quad (6.48)$$

D'après (6.47), $h'(t)$ est négatif pour t dans le voisinage de $t^{imp.}$ avec $t \leq t^{imp.}$. Dans ce cas, l'équation (6.48) implique :

$$\forall t \in [t_0, t^{imp.}], \quad h(t) \approx h(t^{imp.}) + \min(0, h'(t)) \times (t - t^{imp.}) \quad (6.49)$$

où, par définition, $h(t^{imp.}) = 0$ car la particule numérique et l'interface sont à la même position au moment du ré-impact :

$$x_p(t^{imp.}) = x_\Sigma(t^{imp.}) \quad (6.50)$$

On note v_Σ la vitesse de la surface Σ et $v_{p/\Sigma} = (v_p(t) - v_\Sigma(t))$ la vitesse relative de la particule numérique k par rapport à la surface Σ . On a alors :

$$h'(t) = (v_p(t) - v_\Sigma(t)) = v_{p/\Sigma}(t) \quad (6.51)$$

En substituant (6.51) dans (6.49), on obtient :

$$\forall t \in [t_0, t^{imp.}], \quad (t - t^{imp.}) \approx \frac{x_p(t) - x_\Sigma(t)}{\min(0, v_{p/\Sigma}(t))} \quad (6.52)$$

En substituant l'approximation (6.52) dans (6.45), on obtient :

$$s_p^{imp.} \approx -\frac{w_p}{\epsilon} \varrho \left(\frac{x_p(t) - x_\Sigma(t)}{\epsilon \min(0, v_{p/\Sigma}(t))} \right) \quad (6.53)$$

En posant $\hat{\epsilon} = -\epsilon \min(0, v_{p/\Sigma}(t))$, l'équation précédente s'écrit également :

$$s_p^{imp.} \approx w_p \min(0, v_{p/\Sigma}(t)) \underbrace{\frac{1}{\hat{\epsilon}} \varrho \left(\frac{x_\Sigma(t) - x_p(t)}{\hat{\epsilon}} \right)}_{\delta(x_\Sigma(t) - x_p(t))} \quad (6.54)$$

Soit :

$$s_p^{imp.} \approx w_p \min(0, v_{p/\Sigma}(t) \delta(x_\Sigma(t) - x_p(t))) \quad (6.55)$$

L'approximation (6.55) du terme source $s_p^{imp.}$ initialement défini en (6.40) s'appuie sur la relation qu'il existe entre l'instant du ré-impact et la trajectoire de la particule numérique dans le repère relatif à la surface Σ .

Comme on considère le cas où la surface impactée est une interface diffuse entre les deux fluides ($\Sigma = I$), il est nécessaire d'effectuer une troisième étape qui consiste à régulariser le terme en $\delta(x_\Sigma(t) - x_p(t))$ afin que la formulation soit compatible avec ce formalisme.

Dans le formalisme à interface diffuse, la fraction volumique du liquide α_l varie continûment à travers l'interface sur une épaisseur ϵ_I . En se plaçant toujours dans le cas 1D (cf. Figure 6.5), on peut alors considérer que la fraction volumique suit formellement une fonction de Heaviside H_{ϵ_I} régularisée sur une épaisseur ϵ_I et centrée sur l'interface en x_I :

$$\forall t \geq 0, \forall x \in \Omega, \quad \alpha_l(t, x) = H_{\epsilon_I}(x_I(t) - x) \quad (6.56)$$

L'équation (6.56) est vérifiée en particulier pour $x = x_p(t)$. On a alors :

$$\frac{D\alpha_l}{Dt}(t, x_p(t)) = \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}(t, x_p(t)) + \underbrace{\frac{dx_p}{dt}(t)}_{v_p(t)} \frac{\partial \alpha_l}{\partial x}(t, x_p(t)) \quad (6.57)$$

où :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}(t, x_p(t)) &= \frac{dx_I}{dt}(t) \times \frac{dH_{\epsilon_I}}{dt}(x_I(t) - x_p(t)) \\ &= v_I(t) \varrho_{\epsilon_I}(x_I(t) - x_p(t)) \end{aligned} \quad (6.58)$$

et :

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial x}(t, x_p(t)) = -\varrho_{\epsilon_I}(x_I(t) - x_p(t)) \quad (6.59)$$

En substituant (6.58) et (6.59) dans (6.57), on obtient :

$$\frac{D\alpha_l}{Dt}(t, x_p(t)) = \underbrace{(v_I(t) - v_p(t))}_{-v_{p/I}(t)} \varrho_{\epsilon_I}(x_I(t) - x_p(t)) \quad (6.60)$$

En régularisant le terme $\delta(x_I(t) - x_p(t))$ dans l'expression (6.55) du terme source $s_p^{imp.}$ par :

$$\delta(x_I(t) - x_p(t)) \approx \varrho_{\epsilon_I}(x_I(t) - x_p(t)) \quad (6.61)$$

On peut alors substituer (6.60) dans l'expression (6.55) du terme source $s_p^{imp.}$ afin d'obtenir son expression finale :

$$s_p^{imp.} \approx w_p \min\left(0, -\frac{D\alpha_l}{Dt}(t, x_p(t))\right) \quad (6.62)$$

ou encore :

$$s_p^{imp.} \approx -w_p \max \left(0, \frac{D\alpha_l}{Dt}(t, x_p(t)) \right) \quad (6.63)$$

Dans le cas du ré-impact d'une particule numérique sur la phase liquide du modèle bifluide, l'expression (6.63) traduit le fait que la variation du poids numérique de la particule numérique est explicitement reliée à la variation de la fraction volumique de la phase liquide vue par la particule numérique le long de sa trajectoire. La présence de la fonction "max" dans l'expression du terme source nous assure que le terme source de ré-impact ne s'active pas lorsque la particule numérique s'éloigne de l'interface.

Expressions finales de $s_{p,k}^{imp.}$

Finalement, l'expression retenue pour le terme source $s_{p,k}^{imp.}$ intervenant dans (6.39) dépend du type de la surface ré-impactée par la particule numérique k :

▷ Lors d'un ré-impact sur une paroi, elle s'écrit :

$$\boxed{s_{p,k}^{imp.} = -w_{p,k} \delta(t - t_k^{imp.})} \quad (6.64)$$

▷ Lors d'un ré-impact sur une interface diffuse liquide/gaz, elle s'écrit :

$$\boxed{s_{p,k}^{imp.} = -w_p \mathcal{R}_r \max \left(0, \frac{D\alpha_l}{Dt}(t, x_p(t)) \right)} \quad (6.65)$$

où \mathcal{R}_r est une fonction seuil qui permet de contrôler localement l'activation du terme source de ré-impact selon des critères numériques choisis. En particulier, on souhaite que le ré-impact d'une particule soit activé si elle se trouve dans une cellule où la fraction volumique de liquide dans le modèle bifluide est plus grande qu'une certaine valeur seuil $\alpha_l^{imp.}$. L'expression de \mathcal{R}_r est alors définie par :

$$\mathcal{R}_r = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha_l(t, x_p(t)) < \alpha_l^{imp.} \\ \frac{1}{1 - \alpha_l^{imp.}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.66)$$

avec en pratique $\alpha_l^{imp.} = 0.1$.

Par définition, \mathcal{R}_r vérifie :

$$\int_0^1 \mathcal{R}_r d\alpha_l = 1 \quad (6.67)$$

La propriété (6.67) assure qu'une particule traversant entièrement l'interface diffuse est totalement ré-impactée.

Remarque 9

Le choix de la valeur $\alpha_l^{imp.} = 0.1$ a été fait de sorte qu'on ait $\alpha_l^{imp.} > \alpha_l^{atom.}$ afin de s'assurer que les zones d'activation des modèles d'atomisation et de ré-impact soient distinctes. Ceci permet également de prévenir d'éventuelles interactions entre le modèle d'atomisation et le modèle de ré-impact, comme par exemple la création de gouttes par le modèle d'atomisation qui ré-impacteraient aussitôt l'interface gaz/liquide.

Expression de $s_{d \rightarrow r}$

Connaissant l'expression du terme source de ré-impact $s_{p,k}^{imp.}$ intervenant dans l'équation (6.39) décrivant l'évolution du poids numérique d'une particule numérique k , on en déduit l'expression du débit volumique de masse de gouttes ré-impactantes $s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r)}$:

$$s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r)} = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} -m_{p,k} s_{p,k}^{imp.} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,k}) \quad (6.68)$$

Pour donner l'expression du terme $s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \nu_r)}$, on introduit le temps caractéristique d'impact $\tau_{p,k}^{imp.}$ d'une particule numérique k sur une surface Σ . Celui-ci est défini comme la durée que met la particule numérique à traverser la surface Σ :

$$\tau_{p,k}^{imp.} = \begin{cases} \frac{d_{p,k}^{(num)}}{-\mathbf{v}_{p/\Sigma} \cdot \mathbf{n}_\Sigma} & \text{si } \mathbf{v}_{p/\Sigma} \cdot \mathbf{n}_\Sigma < 0 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.69)$$

où :

- la normale à la surface \mathbf{n}_Σ est définie par :

$$\mathbf{n}_\Sigma = \begin{cases} -\frac{\nabla \alpha_l(t, \mathbf{x}_p(t))}{\|\nabla \alpha_l(t, \mathbf{x}_p(t))\|} & \text{si } \Sigma = \text{interface diffuse liquide/gaz} \\ \mathbf{n}_{paroi} & \text{si } \Sigma = \text{paroi} \end{cases} \quad (6.70)$$

- la vitesse relative $\mathbf{v}_{p/\Sigma}$ de la particule numérique k par rapport à la surface Σ est définie par :

$$\mathbf{v}_{p/\Sigma} = \mathbf{v}_{p,k} - \mathbf{v}_\Sigma \quad (6.71)$$

avec la vitesse de la surface Σ donnée par :

$$\mathbf{v}_\Sigma = \begin{cases} \mathbf{v}(t, \mathbf{x}_p(t)) & \text{si } \Sigma = \text{interface diffuse liquide/gaz} \\ \mathbf{v}_{paroi} & \text{si } \Sigma = \text{paroi} \end{cases} \quad (6.72)$$

- le terme $d_{p,k}^{(num)}$ désigne le diamètre caractéristique du nuage de gouttes représenté par la particule numérique k . Celui-ci est estimé par :

$$d_{p,k}^{(num)} = (w_{p,k})^{1/3} d_{p,k} \quad (6.73)$$

À partir de l'expression du temps caractéristique d'impact $\tau_{p,k}^{imp.}$ d'une particule numérique k , on définit la fréquence de ré-impact $\nu_{p,k}^{imp.}$ de celle-ci :

$$\nu_{p,k}^{imp.} = \frac{1}{\tau_{p,k}^{imp.}} \quad (6.74)$$

ce qui permet de formuler le terme source $s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \nu_r)}$ sous la forme suivante :

$$s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \nu_r)} = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} -m_{p,k} \nu_{p,k}^{imp.} s_{p,k}^{imp.} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,k}) \quad (6.75)$$

Le terme $s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \mathbf{v}_r)}$ de couplage sur la quantité de mouvement est donné par :

$$s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \mathbf{v}_r)} = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} -m_{p,k} \mathbf{v}_{p,k} s_{p,k}^{imp.} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,k}) \quad (6.76)$$

Finalement, on a :

$$\mathbf{s}_{d \rightarrow r} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} -m_{p,k} s_{p,k}^{imp.} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,k}) \\ \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} -m_{p,k} \nu_{p,k}^{imp.} s_{p,k}^{imp.} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,k}) \\ \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} -m_{p,k} \mathbf{v}_{p,k} s_{p,k}^{imp.} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,k}) \end{pmatrix} \quad (6.77)$$

6.5.2.2 Expression du terme source $\mathbf{s}_{s \rightarrow r}$

Le terme source de transfert du liquide depuis le modèle bifluide vers le modèle de ré-impact s'écrit :

$$\mathbf{s}_{s \rightarrow r} = -\mathcal{H}(\alpha_g) \nu_r \mathbf{w}_r \quad (6.78)$$

où \mathcal{H} est la fonction de Heaviside définie telle que :

$$\mathcal{H}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.79)$$

Le terme source $\mathbf{s}_{s \rightarrow r}$ fait intervenir la fréquence de ré-impact ν_r afin d'"étaler" temporellement l'injection du liquide dans le modèle bifluide. Cette relaxation garantit la robustesse des schémas numériques mis en œuvre.

Dans (6.78), l'introduction de la fonction $\mathcal{H}(\alpha_g)$ a pour but d'autoriser le transfert du liquide depuis le modèle de ré-impact vers le modèle bifluide uniquement s'il y a assez d'espace localement dans le modèle bifluide pour recevoir le liquide. Dans le cas où cette condition n'est pas vérifiée, le terme de transfert $\mathbf{s}_{s \rightarrow r}$ est désactivé ($\mathcal{H}(\alpha_g) = 0$) et le flux de redistribution intervient (cf. §6.5.2.4).

6.5.2.3 Injection du liquide dans le modèle bifluide

Du point de vue du modèle bifluide, l'injection du liquide en provenance du modèle de ré-impact est assurée par l'ajout d'un terme source $s_{r \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_l)}$ dans l'équation (2.11) de transport de la masse liquide et d'un terme source $s_{r \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})}$ dans l'équation (2.16) de quantité de mouvement du mélange. Pour assurer le bilan de conservation global de la masse et de la quantité de mouvement associées à la phase liquide, ces termes sources ont pour expression :

$$s_{r \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_l)} = -s_{s \rightarrow r}^{(\rho_r)} \quad (6.80)$$

$$s_{r \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})} = -s_{s \rightarrow r}^{(\rho_r \mathbf{v}_r)} \quad (6.81)$$

c'est-à-dire :

$$s_{r \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_l)} = \mathcal{H}_\epsilon(\alpha_g) \nu_r \rho_r \quad (6.82)$$

$$s_{r \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})} = \mathcal{H}_\epsilon(\alpha_g) \nu_r \rho_r \mathbf{v}_r \quad (6.83)$$

Compensation du volume occupé par les gouttes et préservation de la pression

Réciproquement au problème de dépression lié à la suppression d'un volume de liquide dans le modèle bifluide lors de l'atomisation (voir §6.4.1.3), l'injection du volume de liquide ré-impactant dans le modèle bifluide se traduit par la création de surpressions à l'échelle de la cellule. Pour éviter ce problème, on souhaite comme précédemment préserver l'équilibre de la pression en imposant la contrainte que l'injection de liquide soit faite à pression constante (6.29). Cette contrainte implique la suppression d'une certaine quantité de gaz lors de l'injection du liquide. L'expression du terme source $s_{r \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_g)}$ qui correspond au débit volumique de masse gazeuse devant être supprimée dans l'équation de transport du gaz (2.11) est :

$$s_{r \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_g)} = -\frac{\rho_g}{\rho_l} s_{r \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_l)} \quad (6.84)$$

ou encore :

$$s_{r \rightarrow s}^{(\tilde{\rho}_g)} = -\frac{\rho_g}{\rho_l} \mathcal{H}(\alpha_g) \nu_r \rho_r \quad (6.85)$$

Pour tenir compte de la perte de quantité de mouvement associée à la suppression de gaz, on adapte également le terme $s_{r \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})}$ de couplage initialement défini par (6.83) :

$$s_{r \rightarrow s}^{(\rho \mathbf{v})} = \mathcal{H}(\alpha_g) \nu_r \rho_r \left(\mathbf{v}_r - \frac{\rho_g}{\rho_l} \mathbf{v} \right) \quad (6.86)$$

6.5.2.4 Expression du flux de redistribution \mathcal{F}_r

L'ajout de la contrainte que l'injection du liquide dans le modèle bifluide soit faite à pression constante (cf. §6.5.2.3) implique qu'il n'est pas possible d'injecter localement du liquide au delà d'une certaine limite. Cette limite correspond au cas où le volume de liquide à redéposer est supérieur au volume occupé par le gaz présent dans la cellule considérée. Dans ce cas le flux de redistribution entre en jeu afin de redistribuer au sein du modèle de ré-impact la masse résiduelle qui n'a pas pu être injectée dans le modèle bifluide.

Le flux de redistribution \mathcal{F}_r a pour expression :

$$\mathcal{F}_r = (1 - \mathcal{H}(\alpha_g)) \mathbf{v}_r^{red.} \mathbf{w}_r \quad (6.87)$$

Dans l'expression (6.87), le terme $(1 - \mathcal{H}(\alpha_g))$ fait intervenir la fonction \mathcal{H} définie en (6.79). Ce terme est un indicateur des zones où le modèle bifluide est saturé en liquide ($\alpha_l = 1$ et $\alpha_g = 0$), c'est-à-dire des zones où le flux de redistribution doit être activé. En ce qui concerne la vitesse de redistribution $\mathbf{v}_r^{red.}$, elle dépend de la vitesse \mathbf{v}_Σ de la surface Σ impactée et de la vitesse moyenne du liquide à redistribuer \mathbf{v}_r :

$$\mathbf{v}_r^{red.} = -(\mathbf{v}_r - \mathbf{v}_\Sigma) \quad (6.88)$$

où \mathbf{v}_Σ est approximée par la vitesse locale du fluide dans le modèle bifluide :

$$\mathbf{v}_\Sigma = \mathbf{v} \quad (6.89)$$

L'expression (6.88) de la vitesse $\mathbf{v}_r^{red.}$ a été construite de sorte que la redistribution du liquide soit faite dans la direction amont de la trajectoire du liquide impactant dans le repère de la surface impactée. En effet, le cas où le liquide dans le modèle de ré-impact ne peut pas être injecté localement dans le modèle bifluide (car celui-ci est déjà saturé en liquide) peut s'interpréter comme si l'impact de cette masse liquide avait eu lieu à un instant antérieur, dans une zone située en amont de sa trajectoire dans le repère de la surface impactée.

6.6 Discrétisation et implémentation numérique dans le code SLOSH

Dans cette section, nous décrivons les différentes étapes nécessaires à l'implémentation de la méthodologie de couplage dans le code de calcul SLOSH (cf. §4). Ainsi, l'algorithme général utilisé pour résoudre les différentes équations est présenté, puis les schémas numériques intervenant pour la discrétisation des nouvelles équations introduites par le couplage sont détaillés.

6.6.1 Algorithme de couplage

L'algorithme de couplage est basé sur une résolution séquentielle, à chaque itération temporelle, du système d'équations couplées (cf. Figure 6.2). Pour cela, on décompose le système complet d'équations couplées en quatre sous-systèmes qui sont obtenus à partir d'une séparation des opérateurs (*operator splitting*, en anglais) d'ordre 1 en temps. Le principal intérêt de cette décomposition est d'assurer assez de flexibilité et de modularité pour garantir une implémentation générique et performante qui soit facilement adaptable à un code de calcul multi-physique à vocation industrielle tel que la plateforme CEDRE de l'ONERA.

La Figure 6.6 montre les quatre étapes de la résolution numérique telle qu'elle a été implémentée dans le code SLOSH :

- ▷ **Étape 1** : Résolution du système d'équations (2.36) du modèle bifluide (sans les termes de couplage).
- ▷ **Étape 2** : Résolution des équations du modèle de spray (3.22) (avec prise en compte du couplage avec l'écoulement porteur).
- ▷ **Étape 3** : Résolution des équations liées au modèle d'atomisation (avec suppression du liquide dans le modèle bifluide et injection de gouttes dans le modèle de spray).
- ▷ **Étape 4** : Résolution des équations liées au modèle de ré-impact (avec suppression de gouttes dans le modèle de spray et injection de liquide dans le modèle bifluide).

Si on note U^n l'état du système complet à l'instant t^n , le calcul de U^{n+1} à l'instant $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ est effectué en calculant les états intermédiaires $\{U^{(i)}\}_{i=\llbracket 1,4 \rrbracket}$ au cours des étapes successives :

$$U^n = U^{(0)} \xrightarrow{\text{étape 1}} U^{(1)} \xrightarrow{\text{étape 2}} U^{(2)} \xrightarrow{\text{étape 3}} U^{(3)} \xrightarrow{\text{étape 4}} U^{(4)} = U^{n+1} \quad (6.90)$$

La discrétisation des équations résolues à l'étape 1 et à l'étape 2 a été décrite au chapitre §2 et au chapitre §3, respectivement. Il reste à décrire la discrétisation des étapes 3 et 4, ce qui fait l'objet des deux paragraphes suivants.

6.6.2 Discrétisation du modèle d'atomisation

La discrétisation du modèle d'atomisation et des termes de couplage dans le modèle bifluide et le modèle de spray, qui intervient à l'étape 3 de l'algorithme de couplage, est elle-même décomposée en deux sous-étapes qui correspondent à :

- ▷ Sous-étape (a) : suppression du liquide dans le modèle bifluide
- ▷ Sous-étape (b) : injection des gouttes dans le modèle de spray

En reprenant les notations du schéma d'intégration temporelle (6.90), l'étape 3 se décompose en deux sous-étapes sous la forme suivante :

$$U^{(2)} \xrightarrow{\text{sous-étape a}} U^{(2a)} \xrightarrow{\text{sous-étape b}} U^{(2b)} = U^{(3)} \quad (6.91)$$

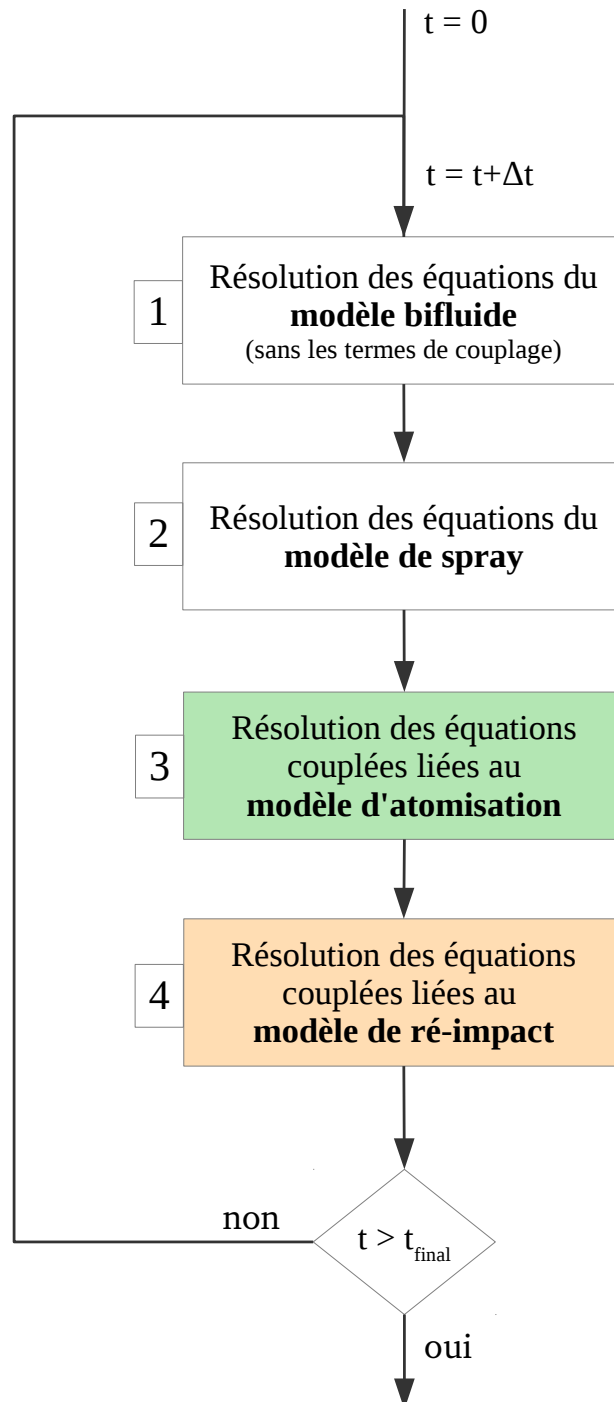


FIGURE 6.6 – Algorithme de couplage entre le modèle bifluide et le modèle de spray.

Sous-étape (a) : suppression du liquide dans le modèle bifluide

Cette sous-étape consiste à transférer le liquide depuis le modèle bifluide vers le modèle d'atomisation en résolvant numériquement le système continu suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}) = \mathbf{s}_{a \rightarrow s} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}_a) = \mathbf{s}_{s \rightarrow a} \end{cases} \quad \begin{matrix} (6.92a) \\ (6.92b) \end{matrix}$$

Ce système correspond, en explicitant tous les termes, au système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}_l) = -\frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \\ \frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}_g) = \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) = -\left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_l}\right) \frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \mathbf{v} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_a) = \frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_a \mathbf{v}_a) = \frac{\tilde{\rho}_l}{\tau_a} \mathcal{R}_a \mathbf{v} \end{cases} \quad \begin{matrix} (6.93a) \\ (6.93b) \\ (6.93c) \\ (6.93d) \\ (6.93e) \end{matrix}$$

L'équation (6.93a) est discrétisée avec un schéma temporel implicite qui garanti par construction la positivité de la masse liquide quelque soit le pas de temps de discrétisation Δt :

$$\tilde{\rho}_l|_i^{(2a)} = \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} - \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} \left(\frac{1}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_a|_i^{(2)}} \mathcal{R}_a|_i^{(2)}} - 1 \right) \quad (6.94)$$

On pose alors :

$$\Delta \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} = \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} \left(\frac{1}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_a|_i^{(2)}} \mathcal{R}_a|_i^{(2)}} - 1 \right) \quad (6.95)$$

ce qui permet d'écrire le système d'équations discrètes associé au système continu (6.93) :

$$\begin{cases} \tilde{\rho}_l|_i^{(2a)} = \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} - \Delta \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} \\ \tilde{\rho}_g|_i^{(2a)} = \tilde{\rho}_g|_i^{(2)} + \frac{\rho_g|_i^{(2)}}{\rho_l|_i^{(2)}} \Delta \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} \\ (\rho \mathbf{v})|_i^{(2a)} = (\rho \mathbf{v})|_i^{(2)} - \left(1 - \frac{\rho_g|_i^{(2)}}{\rho_l|_i^{(2)}}\right) \Delta \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} \mathbf{v}|_i^{(2)} \\ \rho_a|_i^{(2a)} = \rho_a|_i^{(2)} + \Delta \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} \\ (\rho_a \mathbf{v}_a)|_i^{(2a)} = (\rho_a \mathbf{v}_a)|_i^{(2)} + \Delta \tilde{\rho}_l|_i^{(2)} \mathbf{v}|_i^{(2)} \end{cases} \quad \begin{matrix} (6.96a) \\ (6.96b) \\ (6.96c) \\ (6.96d) \\ (6.96e) \end{matrix}$$

Sous-étape (b) : injection des gouttes dans le modèle de spray

Cette sous-étape consiste à transférer le liquide depuis le modèle d'atomisation vers le modèle de spray en l'injectant sous forme de gouttes. Pour cela, on résout le système continu suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}_a) = \mathbf{s}_{d \rightarrow a} & (6.97a) \\ \text{Conditions d'injection des gouttes} & (6.97b) \end{cases}$$

Pour injecter les gouttes, on calcule au préalable la masse de liquide à injecter au cours d'un pas de temps Δt :

$$m_a|_i^{(2a)} = \rho_a|_i^{(2a)} |\Omega_i| \quad (6.98)$$

Ensuite, le nombre de particules numériques $N_{p,inj}|_i^{(2a)}$ à injecter dans une cellule Ω_i au cours du pas de temps est calculé à partir de la relation discrète correspondant à l'inégalité (6.21) :

$$N_{p,inj}|_i^{(2b)} = \left\lfloor \frac{m_a|_i^{(2a)}}{m_p^{(num)}} \right\rfloor \quad (6.99)$$

où on note $\lfloor x \rfloor$ la partie entière de x .

La vitesse initiale de chaque particule numérique k injectée dans une cellule Ω_i est donnée par :

$$\mathbf{v}_p|_k^{(2b)} = \mathbf{v}_a|_i^{(2a)} \quad (6.100)$$

Pour finir, la mise à jour des grandeurs liées au modèle d'atomisation est effectuée avec le schéma numérique suivant :

$$\begin{cases} \rho_a|_i^{(2b)} = \rho_a|_i^{(2a)} - \frac{1}{|\Omega_i|} \left(N_{p,inj}|_i^{(2b)} m_p^{(num)} \right) & (6.101a) \\ (\rho_a \mathbf{v}_a)|_i^{(2b)} = (\rho_a \mathbf{v}_a)|_i^{(2a)} - \frac{1}{|\Omega_i|} \left(N_{p,inj}|_i^{(2b)} m_p^{(num)} \mathbf{v}_a|_i^{(2a)} \right) & (6.101b) \end{cases}$$

6.6.3 Discrétisation du modèle de ré-impact

Comme pour la discrétisation du modèle d'atomisation traitée au paragraphe précédent, la discrétisation du modèle de ré-impact qui intervient à l'étape 4 de l'algorithme de couplage est faite en plusieurs sous-étapes :

- ▷ Sous-étape (a) : suppression des gouttes dans le modèle de spray
- ▷ Sous-étape (b) : injection du liquide dans le modèle bifluide
- ▷ Sous-étape (c) : redistribution du liquide au sein du modèle de ré-impact

En reprenant les notations du schéma d'intégration temporelle (6.90), l'étape 4 se décompose en trois sous-étapes sous la forme suivante :

$$U^{(3)} \xrightarrow{\text{sous-étape a}} U^{(3a)} \xrightarrow{\text{sous-étape b}} U^{(3b)} \xrightarrow{\text{sous-étape c}} U^{(3c)} = U^{(4)} \quad (6.102)$$

Sous-étape (a) : suppression des gouttes dans le modèle de spray

Cette sous-étape consiste à transférer le liquide sous forme de gouttes dans le modèle de spray vers le modèle de ré-impact en résolvant le système continu suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}_r) = \mathbf{s}_{d \rightarrow r} & (6.103a) \\ \text{Conditions de suppression des gouttes en cas de ré-impact} & (6.103b) \end{cases}$$

Les grandeurs associées au modèle de ré-impact sont mises à jour en utilisant un schéma de discrétisation temporelle explicite :

$$\mathbf{w}_r|_i^{(3a)} = \mathbf{w}_r|_i^{(3)} + \frac{\Delta t}{|\Omega_i|} \mathbf{s}_{d \rightarrow r}|_i^{(3)} \quad (6.104)$$

où le terme source $\mathbf{s}_{d \rightarrow r}|_i^{(3)}$ a pour expression :

$$\begin{cases} s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r)}|_i^{(3)} = - \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} \phi_{k \rightarrow i}^{(3)} m_p|_k^{(3)} s_p^{imp.}|_k^{(3)} & (6.105a) \\ s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \nu_r)}|_i^{(3)} = - \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} \phi_{k \rightarrow i}^{(3)} \nu_p^{imp.}|_k^{(3)} m_p|_k^{(3)} s_p^{imp.}|_k^{(3)} & (6.105b) \\ s_{d \rightarrow r}^{(\rho_r \mathbf{v}_r)}|_i^{(3)} = - \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} \phi_{k \rightarrow i}^{(3)} \mathbf{v}_p|_k^{(3)} m_p|_k^{(3)} s_p^{imp.}|_k^{(3)} & (6.105c) \end{cases}$$

Dans (6.105), les expressions de $\phi_{k \rightarrow i}^{(3)}$ et $s_p^{imp.}|_k^{(3)}$ dépendent de l'historique de chaque particule numérique k au cours du pas de temps :

- Si la particule numérique k a impacté une face limite Γ adjacente à la cellule Ω_j , on a alors :

$$\phi_{k \rightarrow i}^{(3)} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.106)$$

et :

$$s_p^{imp.}|_k^{(3)} = - \frac{w_p|_k^{(3)}}{\Delta t} \quad (6.107)$$

Également, la particule numérique est supprimée (car $w_p|_k^{(3a)} = 0$).

- Si la particule est toujours dans le domaine de simulation, on a alors :

$$\phi_{k \rightarrow i}^{(3)} = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x}_p|_k^{(3)} \in \Omega_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.108)$$

et :

$$s_p^{imp.}|_k^{(3)} = - \frac{w_p|_k^{(3)}}{\Delta t} \mathcal{R}_r|_k^{(3)} \max \left(0, \alpha_l^{(3)}(\mathbf{x}_p|_k^{(3)}) - \alpha_l^n(\mathbf{x}_p|_k^n) \right) \quad (6.109)$$

avec :

$$\mathcal{R}_r|_k^{(3)} = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha_l^{(3)}(\mathbf{x}_p|_k^{(3)}) < \alpha_l^{imp.} \\ \frac{1}{1 - \alpha_l^{imp.}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.110)$$

Également, la mise à jour du poids numérique de la particule numérique est effectuée avec le schéma suivant :

$$w_p|_k^{(3a)} = w_p|_k^{(3)} + \Delta t \, s_p^{imp.}|_k^{(3)} \quad (6.111)$$

Sous-étape (b) : injection du liquide dans le modèle bifluide

Cette sous-étape consiste à transférer le liquide stocké dans le modèle de ré-impact vers le modèle bifluide en résolvant le système continu suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}) = \mathbf{s}_{r \rightarrow s} \end{cases} \quad (6.112a)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}_r) = \mathbf{s}_{s \rightarrow r} \end{cases} \quad (6.112b)$$

En explicitant tous les termes du système (6.112), on obtient :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}_l) = \mathcal{H}(\alpha_g) \, \nu_r \, \rho_r \end{cases} \quad (6.113a)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}_g) = -\frac{\rho_g}{\rho_l} \mathcal{H}(\alpha_g) \, \nu_r \, \rho_r \end{cases} \quad (6.113b)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) = \mathcal{H}(\alpha_g) \, \nu_r \, \rho_r \left(\mathbf{v}_r - \frac{\rho_g}{\rho_l} \mathbf{v} \right) \end{cases} \quad (6.113c)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_r) = -\mathcal{H}(\alpha_g) \, \nu_r \, \rho_r \end{cases} \quad (6.113d)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_r \nu_r) = -\mathcal{H}(\alpha_g) \, \nu_r^2 \, \rho_r \end{cases} \quad (6.113e)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_r \mathbf{v}_r) = -\mathcal{H}(\alpha_g) \, \nu_r \, \rho_r \mathbf{v}_r \end{cases} \quad (6.113f)$$

Lors du développement des schémas numériques nécessaires à la résolution du système (6.113), une attention particulière a été portée à la discrétisation des équations (6.113b), (6.113d), (6.113e) afin de garantir la positivité des variables $\tilde{\rho}_g$, ρ_r , et ν_r quelque soit le pas de temps Δt ou les quantités de masse transférées.

Pour l'équation (6.113b), on utilise le schéma suivant :

$$\tilde{\rho}_g|_i^{(3b)} = \tilde{\rho}_g|_i^{(3a)} + \Delta \tilde{\rho}_g|_i^{(3a)} \quad (6.114)$$

où :

$$\Delta \tilde{\rho}_g|_i^{(3a)} = -\min \left(\tilde{\rho}_g|_i^{(3a)}, \Delta t \frac{\rho_g|_i^{(3a)}}{\rho_l|_i^{(3a)}} \nu_r|_i^{(3a)} \rho_r|_i^* \right) \quad (6.115)$$

et, où le terme $\rho_r|_i^*$ est obtenu par une discrétisation implicite de l'équation (6.113d) (sans le terme $\mathcal{H}(\alpha_g)$ au second membre) :

$$\rho_r|_i^* = \rho_r|_i^{(3a)} \left(\frac{1}{1 + \Delta t \, \nu_r|_i^{(3a)}} \right) \quad (6.116)$$

Pour assurer la conservativité exacte au niveau discret, on exprime ensuite les termes sources numériques dans les autres équations du système (6.113) en fonction de $\Delta\tilde{\rho}_g|_i^{(3a)}$ ou en fonction de $\Delta\rho_r|_i^{(3a)}$ définie par :

$$\Delta\rho_r|_i^{(3a)} = \frac{\rho_l|_i^{(3a)}}{\rho_g|_i^{(3a)}} \Delta\tilde{\rho}_g|_i^{(3a)} \quad (< 0) \quad (6.117)$$

ce qui donne finalement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\rho}_l|_i^{(3b)} = \tilde{\rho}_l|_i^{(3a)} - \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \\ (\rho\mathbf{v})|_i^{(3b)} = (\rho\mathbf{v})|_i^{(3a)} - \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \left(\mathbf{v}_r|_i^{(3a)} - \frac{\rho_g|_i^{(3a)}}{\rho_l|_i^{(3a)}} \mathbf{v}|_i^{(3a)} \right) \\ \rho_r|_i^{(3b)} = \rho_r|_i^{(3a)} + \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \\ (\rho_r\nu_r)|_i^{(3b)} = (\rho_r\nu_r)|_i^{(3a)} + \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \nu_r|_i^{(3a)} \\ (\rho_r\mathbf{v}_r)|_i^{(3b)} = (\rho_r\mathbf{v}_r)|_i^{(3a)} + \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \mathbf{v}_r|_i^{(3a)} \end{array} \right. \quad (6.118a)$$

$$\left(\rho\mathbf{v} \right)|_i^{(3b)} = \left(\rho\mathbf{v} \right)|_i^{(3a)} - \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \left(\mathbf{v}_r|_i^{(3a)} - \frac{\rho_g|_i^{(3a)}}{\rho_l|_i^{(3a)}} \mathbf{v}|_i^{(3a)} \right) \quad (6.118b)$$

$$\rho_r|_i^{(3b)} = \rho_r|_i^{(3a)} + \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \quad (6.118c)$$

$$(\rho_r\nu_r)|_i^{(3b)} = (\rho_r\nu_r)|_i^{(3a)} + \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \nu_r|_i^{(3a)} \quad (6.118d)$$

$$(\rho_r\mathbf{v}_r)|_i^{(3b)} = (\rho_r\mathbf{v}_r)|_i^{(3a)} + \Delta\rho_r|_i^{(3a)} \mathbf{v}_r|_i^{(3a)} \quad (6.118e)$$

Sous-étape (c) : redistribution du liquide au sein du modèle de ré-impact

Cette sous-étape consiste à redistribuer dans le modèle de ré-impact tout le liquide qui n'a pas pu être ré-injecté dans le modèle bifluide au cours d'un pas de temps. Pour cela, on résout le système suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}_r) + \nabla \cdot \mathcal{F}_r = 0 \quad (6.119)$$

En explicitant certains termes, le système (6.119) s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_r) = -\nabla \cdot \left((1 - \mathcal{H}_\epsilon(\alpha_g)) \rho_r \mathbf{v}_r^{red.} \right) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_r \nu_r) = -\nabla \cdot \left((1 - \mathcal{H}_\epsilon(\alpha_g)) \rho_r \nu_r \mathbf{v}_r^{red.} \right) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_r \mathbf{v}_r) = -\nabla \cdot \left((1 - \mathcal{H}_\epsilon(\alpha_g)) \rho_r \mathbf{v}_r \otimes \mathbf{v}_r^{red.} \right) \end{array} \right. \quad (6.120a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_r \nu_r) = -\nabla \cdot \left((1 - \mathcal{H}_\epsilon(\alpha_g)) \rho_r \nu_r \mathbf{v}_r^{red.} \right) \quad (6.120b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_r \mathbf{v}_r) = -\nabla \cdot \left((1 - \mathcal{H}_\epsilon(\alpha_g)) \rho_r \mathbf{v}_r \otimes \mathbf{v}_r^{red.} \right) \quad (6.120c)$$

Le système d'équations (6.120) est discrétisé par un schéma de type volume fini. En reprenant les notations introduites au paragraphe §2.2, le schéma s'écrit :

$$\mathbf{w}_r|_i^{n+1} = \mathbf{w}_r|_i^{(3c)} = \mathbf{w}_r|_i^{(3b)} + \frac{\Delta t}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \mathbf{F}_r|_{ij} |\Gamma_{ij}| \quad (6.121)$$

où $\mathbf{F}_r|_{ij}$ est le flux numérique de redistribution, décentré par rapport à la vitesse $\mathbf{v}_r^{red.}$, qui a pour expression :

$$\mathbf{F}_r|_{ij} = \begin{cases} v_r^{red.}|_{ij} \mathbf{w}_r|_i^{(3b)} & \text{si } v_r^{red.}|_{ij} \geq 0 \\ v_r^{red.}|_{ij} \mathbf{w}_r|_j^{(3b)} & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.122)$$

avec $v_r^{red.}|_{ij}$ la vitesse de redistribution sur la face Γ_{ij} qui est donnée par :

$$v_r^{red.}|_{ij} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{v}_r^{red.}|_i^{(3b)} + \mathbf{v}_r^{red.}|_j^{(3b)} \right) \cdot \mathbf{n}_{ij} \quad (6.123)$$

Le schéma numérique (6.121) est stable si la condition de type CFL suivante est respectée :

$$\forall i \in \llbracket 1, \mathcal{N}_c \rrbracket, \quad \frac{\Delta t}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_f(i)} \left(|v_r^{red.}|_{ij} | \Gamma_{ij} | \right) \leq 1 \quad (6.124)$$

Cette condition de stabilité (6.124) peut conduire à un pas de temps Δt_r plus petit que le pas de temps global Δt du cycle temporel complet (ceci est très rare en pratique). Dans ce cas, on effectue k sous-itérations temporelles avec un pas le temps Δt_r lors de la résolution de (6.121), jusqu'à ce qu'on ait atteint le pas de temps global (c'est-à-dire : $k\Delta t_r = \Delta t$).

En ce qui concerne les conditions limites pour le schéma numérique (6.121), on impose que le flux numérique (6.122) soit nul sur les conditions limites de type paroi. Pour les conditions limites de type entrée ou sortie, on calcule la valeur de \mathbf{w}_r dans les cellules limites en imposant des conditions de Neumann homogènes sur les faces limites pour toutes les grandeurs.

6.7 Cas de validation pour le modèle de ré-impact

Dans cette section, nous présentons un cas test permettant de valider et d'analyser qualitativement le comportement du modèle de ré-impact sur une configuration simple correspondant à un spray de gouttes impactant sur le fond d'un réservoir et le remplissant progressivement. Pour le modèle d'atomisation, comme il est difficile de trouver un cas test simple et physiquement représentatif, sa validation a été réalisée à travers les simulations multi-échelles d'une nappe liquide cisailée présentées au §7.

6.7.1 Configuration

On considère un réservoir, de largeur $L_x = 10mm$ et de hauteur $L_y = 20mm$ (cf. Figure 6.7), initialement rempli d'air et dans lequel on injecte un spray de gouttes d'eau entre l'instant $t = 0s$ et $t = 0.25s$. La zone d'injection des gouttes est un domaine de taille $[1mm \times 0.1mm]$ centré en $X_{inj} = (5mm, 15.05mm)$. Les gouttes sont injectées avec une vitesse verticale de $v_{p,inj}^{(y)} = -0.5m/s$, de sorte qu'elles aillent impacter le fond du réservoir. Le débit massique de gouttes injectées est fixé à $\dot{m}_{inj} = 0.2kg.s^{-1}$. Les propriétés de l'air et de l'eau dans le modèle bifluide, ainsi que les caractéristiques des particules numériques du spray, sont données dans le Tableau 6.2. Le coefficient de tension de surface entre l'air et l'eau dans le modèle bifluide est égal à $\sigma = 0.07N.m^{-1}$. La gravité est également prise en compte : $g = -10m.s^{-1}$.

Gaz			Liquide			Particules numériques		
$\rho_{0,g}$	1.225	$kg.m^{-3}$	$\rho_{0,l}$	1000	$kg.m^{-3}$	ρ_p	1000	$kg.m^{-3}$
$c_{0,g}$	340	$m.s^{-1}$	$c_{0,l}$	1480	$m.s^{-1}$	d_p	250	μm
$p_{0,g}$	1000	hPa	$p_{0,l}$	1000	hPa	$\mathbf{v}_{p,inj}$	(0,-0.5)	$m.s^{-1}$
μ_g	15.6E-6	$Pa.s$	μ_l	1.E-3	$Pa.s$	$m_p^{(num)}$	2.0E-6	kg

Tableau 6.2 – Propriétés du gaz et du liquide dans le modèle bifluide, et des particules numériques dans le modèle de spray

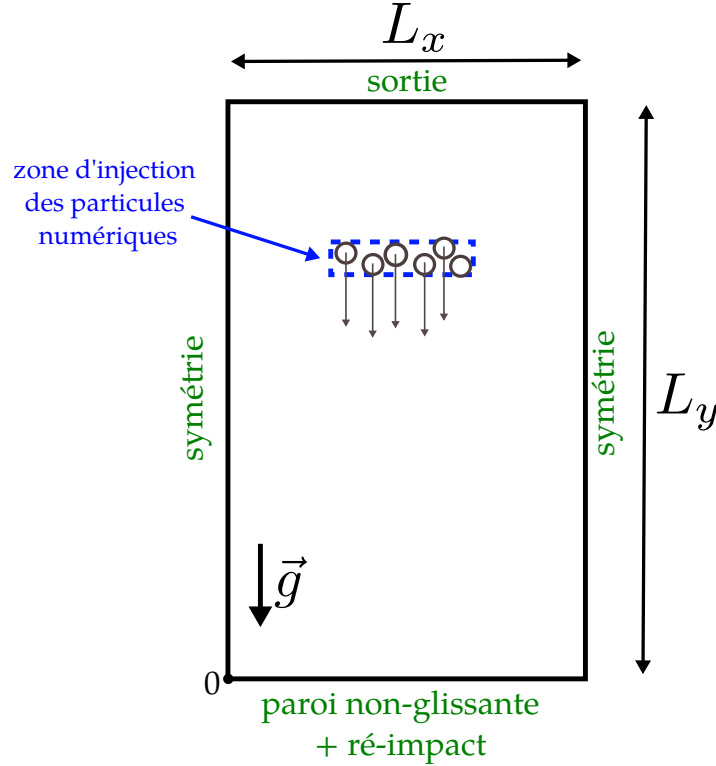


FIGURE 6.7 – Configuration du cas test de validation pour le modèle de ré-impact.

6.7.2 Résultats

La Figure 6.8 montre des vues instantanées des résultats de la simulation où nous avons superposé le champ de fraction volumique du liquide du modèle bifluide et les particules numériques du modèle de spray (celles-ci sont représentées avec une taille proportionnelle à leur poids numérique).

Au cours de la simulation, on distingue plusieurs phases successives :

- ▷ *Développement du spray* : Entre $t = 0s$ et $t \simeq 0.025s$, les particules numériques se rapprochent de la paroi inférieure du réservoir.
- ▷ *Début de l'impact* : Vers $t \simeq 0.025s$, les premières particules numériques atteignent la paroi. Au niveau du point d'impact, l'augmentation de la fraction volumique de liquide du modèle bifluide montre que le transfert du liquide du modèle de ré-impact vers ce dernier s'effectue correctement. Sous l'effet des forces capillaires, le liquide forme une goutte et ne s'étale pas immédiatement au fond du réservoir.
- ▷ *Remplissage du réservoir* : De $t \simeq 0.025s$ à $t \simeq 0.25s$, le remplissage du réservoir se poursuit et les particules impactent désormais sur l'interface gaz/liquide. On remarque que le poids numérique des particules diminue (leur taille diminue sur les images) au fur et à mesure que celles-ci traversent l'interface gaz/liquide. Ceci est cohérent avec l'expression du terme de ré-impact (6.65) formulée pour une interface supposée diffuse. On observe également que l'interface gaz/liquide est courbée à cause de "la pression d'impact" du spray sur l'interface. Ce phénomène est reproduit, au moins qualitativement, grâce au terme de transfert de quantité de mouvement du spray vers la phase liquide du modèle bifluide à travers le modèle de ré-impact.
- ▷ *Fin de l'impact* : À partir de $t \simeq 0.25s$, l'injection du spray est stoppée : on observe alors le ré-impact des dernières particules numériques. L'interface gaz/liquide retourne

ensuite à une position horizontale d'équilibre.

Afin d'observer de manière quantitative l'évolution des transferts de masse liquide entre le modèle de spray, le modèle de ré-impact et le modèle bifluide, nous avons calculé les quantités suivantes au cours du temps :

- La masse totale de liquide injectée depuis l'instant initial :

$$M_{inj}(t^n) = \int_0^{t^n} \dot{m}_{inj}(\tau) \, d\tau \quad (6.125)$$

- La masse totale de liquide sous forme de spray dans le domaine :

$$M_P(t^n) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_p} m_p|_k^n \quad (6.126)$$

- La masse totale de liquide accumulée dans le modèle de ré-impact :

$$M_R(t^n) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_c} \rho_r|_i^n |\Omega_i| \quad (6.127)$$

$$(6.128)$$

- La masse totale de la phase liquide dans le modèle bifluide :

$$M_L(t^n) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_c} \tilde{\rho}_l|_i^n |\Omega_i| \quad (6.129)$$

$$(6.130)$$

L'ensemble de ces grandeurs est tracé sur la [Figure 6.9a](#). On retrouve bien sur ces courbes les différentes phases décrites précédemment. On observe également que la masse liquide M_R présente dans le modèle de ré-impact reste relativement faible et que sa valeur est quasiment constante après un régime transitoire. On en conclut que la méthode de relaxation (temporelle), permettant d'assurer la robustesse de la méthode de couplage lors du transfert du liquide depuis le modèle de ré-impact vers le modèle bifluide, a une influence négligeable sur la dynamique du remplissage.

Sur la [Figure 6.9b](#), nous avons également représenté la quantité ΔM définie par :

$$\Delta M = M_{inj} - (M_P + M_R + M_L) \quad (6.131)$$

On vérifie bien que cette valeur est nulle : le couplage du modèle de spray avec le modèle bifluide par l'intermédiaire du modèle de ré-impact conserve bien la masse de liquide.

6.8 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté la méthodologie développée au cours de cette thèse pour coupler le modèle bifluide (cf. chapitre [§2](#)) et le modèle de spray (cf. chapitre [§3](#)). Pour assurer la flexibilité et la robustesse de la méthodologie, le couplage est réalisé par l'intermédiaire d'un modèle d'atomisation et d'un modèle de ré-impact, ces derniers étant chacun associé à un système de lois de conservation portant sur les grandeurs transférées.

Le modèle d'atomisation permet de transférer la masse et la quantité de mouvement du liquide atomisé depuis le modèle bifluide vers le modèle de spray. La quantité de liquide à

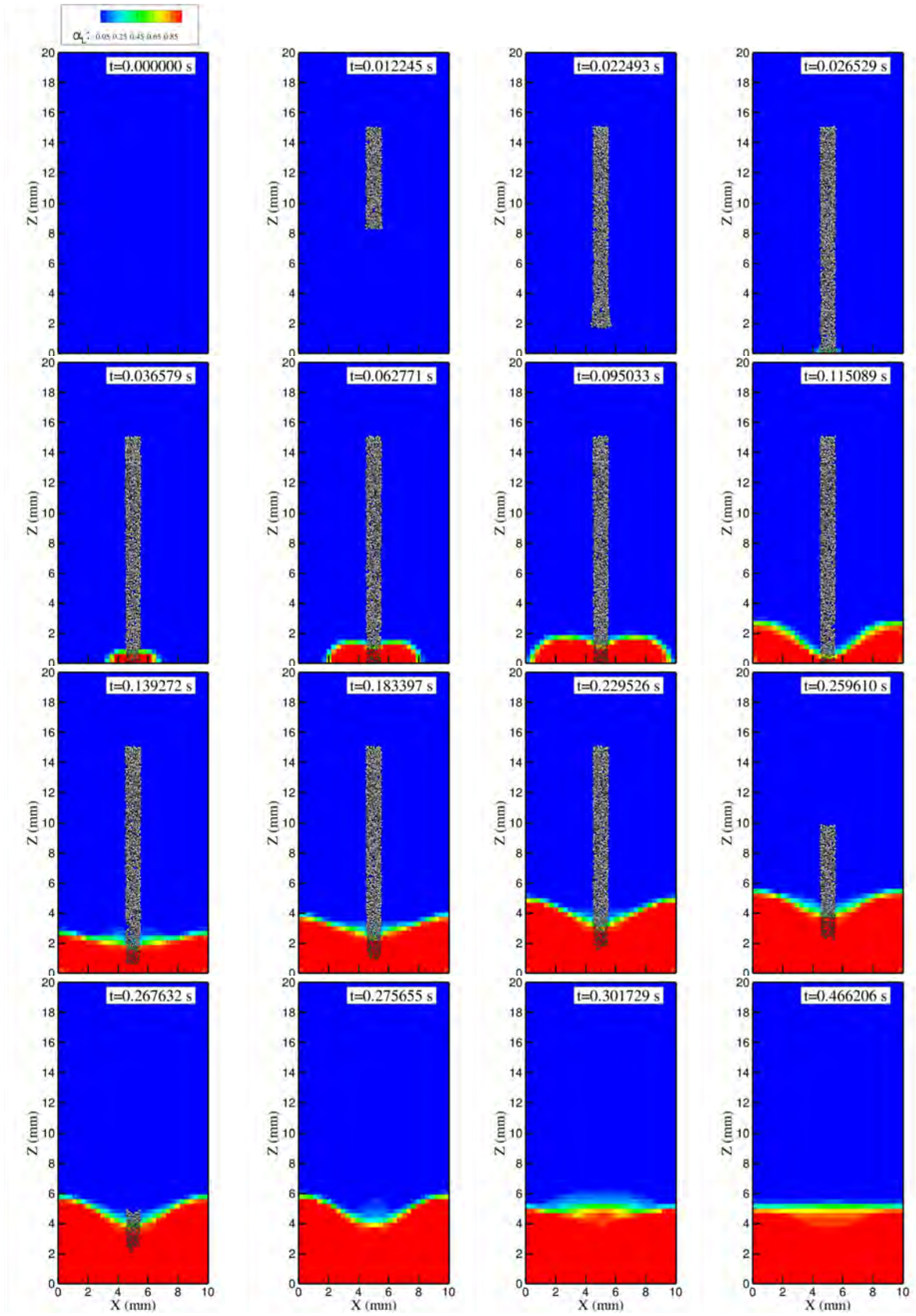
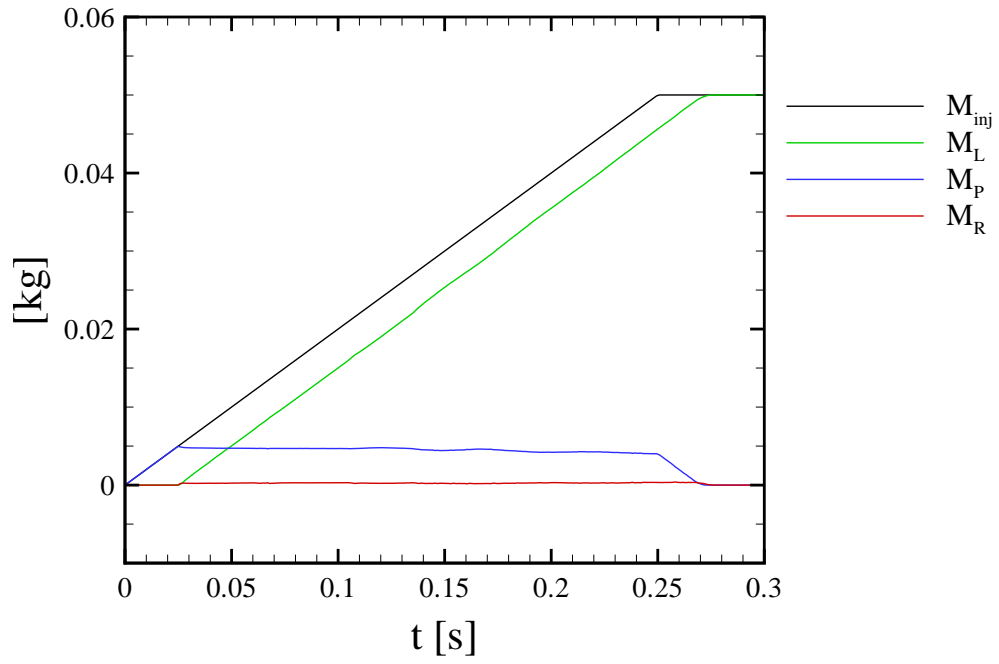
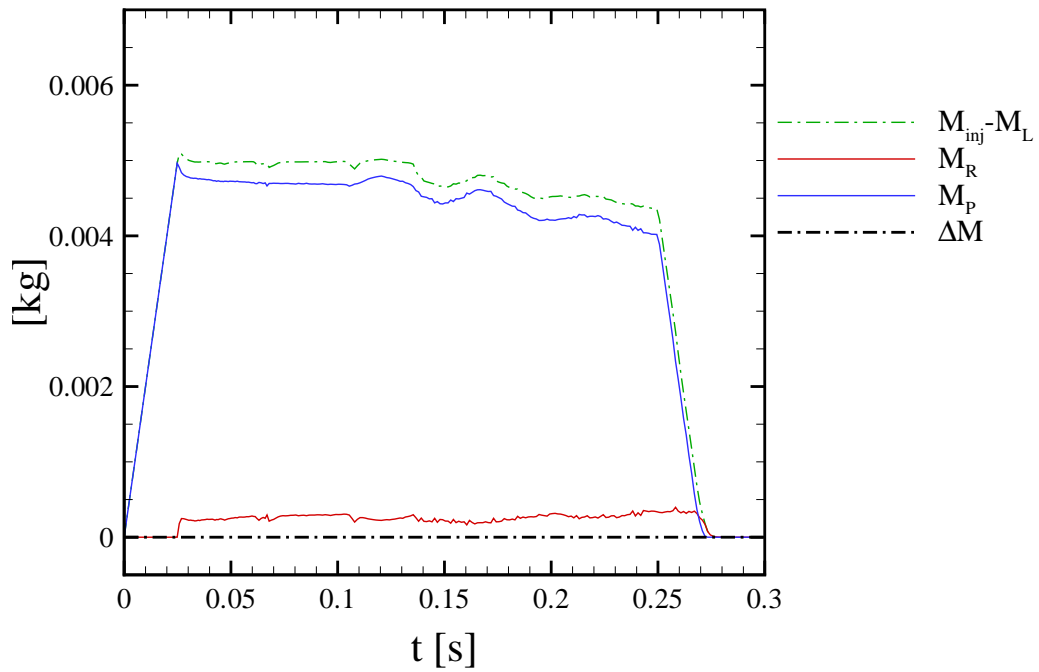


FIGURE 6.8 – Simulation multi-échelle du remplissage d'un réservoir avec un spray de gouttes impactant la paroi du bas.



(a)



(b)

FIGURE 6.9 – Courbes d'évolution temporelle du transfert de la masse du liquide obtenues pour la simulation du cas test de ré-impact.

atomiser est déterminée localement à partir d'un critère basé sur des considérations physiques (cisaillement important, topologie de l'interface par rapport à l'écoulement) et sur des considérations numériques (diffusion de l'interface). La vitesse d'injection des gouttes dans le modèle de spray est également calculée par le modèle d'atomisation. Seule la taille caractéristique des gouttes créées n'est actuellement pas prédite par ce dernier et doit être imposée.

Réciproquement, le modèle de ré-impact permet de transférer la masse et la quantité de mouvement des gouttes vers la phase liquide du modèle bifluide lorsque le spray impacte sur une paroi ou sur une interface gaz/liquide. Pour ce deuxième cas, une attention particulière a été portée à la formulation du critère de ré-impact afin que celui-ci soit compatible avec la formulation à interface diffuse du modèle bifluide. Un temps caractéristique de ré-impact a également été introduit afin de relaxer le transfert du liquide et d'assurer la robustesse de la méthode numérique.

Le cas test d'un spray impactant sur une paroi a permis de montrer la robustesse de la méthodologie de couplage en cas de ré-impact. Le cas de l'atomisation sera quant à lui présenté dans le chapitre suivant dans le cadre de simulations multi-échelles de la pulvérisation assistée d'une nappe liquide.

Chapitre 7

Application à la simulation de l'atomisation assistée d'une nappe liquide plane

Sommaire

7.1	Description de la configuration expérimentale de référence . . .	154
7.1.1	Présentation du banc d'essai SHAPE	154
7.1.1.1	Configurations géométriques	154
7.1.1.2	Conditions opératoires	156
7.1.2	Principaux résultats expérimentaux disponibles	157
7.2	Simulations 2D de nappes liquides planes cisillées.	160
7.2.1	Paramètres numériques	161
7.2.1.1	Configurations géométriques	161
7.2.1.2	Maillages	161
7.2.1.3	Régimes de fonctionnement étudiés	162
7.2.1.4	Récapitulatif des simulations effectuées	164
7.2.2	Résultats des simulations 2D monophasiques	164
7.2.2.1	Champs instantanés	165
7.2.2.2	Champs moyens	165
7.2.2.3	Analyse fréquentielle	173
7.2.2.4	Synthèse	178
7.2.3	Résultats des simulations 2D diphasiques du cœur liquide (sans couplage avec le modèle d'atomisation)	179
7.2.3.1	Champs instantanés	179
7.2.3.2	Longueur de rupture moyenne du cœur liquide	180
7.2.3.3	Fréquence d'oscillation globale du cœur liquide	185
7.2.3.4	Synthèse	185
7.2.4	Résultats des simulations 2D avec la méthodologie de couplage	189
7.2.4.1	Visualisations globales des résultats des simulations avec couplage	189
7.2.4.2	Développement du spray en aval de l'injecteur	191
7.2.4.3	Synthèse	191
7.3	Simulations 3D de la nappe liquide plane cisillée	194
7.3.1	Paramètres numériques	194
7.3.2	Résultats des simulations 3D diphasiques du cœur liquide (sans couplage avec le modèle d'atomisation)	194

7.3.2.1	Visualisation globale du cœur liquide	194
7.3.2.2	Longueur de rupture moyenne et fréquence de battement du cœur liquide	196
7.3.3	Résultats préliminaires des simulations 3D avec la méthodologie de couplage	196
7.4	Conclusion du chapitre	201

Ce chapitre est consacré à la présentation de l'application de la méthodologie de couplage à la simulation d'une nappe liquide cisailée. L'objectif principal de cette application est de valider en conditions réelles l'ensemble de l'approche développée dans les chapitres précédents. Afin de disposer de données de référence, la configuration étudiée expérimentalement par Déjean [27] à l'Onera a été retenue.

Dans un premier temps, nous décrivons la configuration expérimentale de référence. Puis, les résultats obtenus grâce à une étude par simulations bidimensionnelles sont présentés. Enfin, nous présentons les premières simulations 3D réalisées afin de prouver la faisabilité de l'approche et le bon comportement qualitatif du modèle bifluide.

7.1 Description de la configuration expérimentale de référence

7.1.1 Présentation du banc d'essai SHAPE

Le banc d'essai SHAPE (*Sheet And Prefilming Experiment*) a été conçu et réalisé à l'ONERA. Ce banc d'essai a été utilisé dans le cadre de plusieurs études expérimentales [56, 55, 30, 12] visant à améliorer la compréhension et le contrôle des mécanismes de l'atomisation assistée d'une nappe liquide.

Bien que les injecteurs aéronautiques industriels soient généralement conçus pour produire des nappes liquides annulaires, l'étude d'une nappe en configuration plane a l'avantage de faciliter la mise en place de protocoles de mesure. De plus, Chigier et Dumouchel [18] et Berthoumieu *et al.* [8] ont montré qu'une nappe annulaire a un comportement très similaire à une nappe plane si le ratio du rayon de l'injecteur annulaire sur l'épaisseur de la nappe annulaire est très grand devant l'unité. Pour ces raisons, le banc SHAPE a été conçu pour étudier des nappes planes bidimensionnelles. L'attribut *bidimensionnel* est généralement utilisé pour caractériser une nappe liquide plane dont l'épaisseur est très faible devant sa largeur transversale, de sorte que l'on puisse considérer que les effets de bord n'affectent pas le comportement global de la nappe.

Récemment, les travaux de Déjean *et al.* [28] et Déjean [27] ont été effectués sur le banc d'essai SHAPE en faisant varier la configuration géométrique pour différents points de fonctionnement afin d'étudier, entre autre, l'influence de l'écoulement d'air cisailant sur l'atomisation d'une nappe liquide plane. L'ensemble de l'étude numérique présentée dans ce chapitre se base sur ces travaux expérimentaux. Dans le paragraphe suivant, on décrit les configurations géométriques utilisées au cours de ces travaux.

7.1.1.1 Configurations géométriques

L'injecteur

La formation d'une nappe liquide plane bidimensionnelle est assurée par un injecteur dont le profil extérieur est un NACA 63-010 tronqué au niveau du bord de fuite et tel que la corde totale du profil soit de 89mm (cf. Figure 7.1). L'assemblage du profil complet est effectué après avoir préalablement usiné les faces internes de chaque moitié pour créer une fente au

sein de l'injecteur qui permette d'acheminer le liquide de son centre à son bord de fuite. Trois injecteurs ont été réalisés avec des fentes d'épaisseurs différentes afin de faire varier l'épaisseur de la nappe liquide en sortie. Les épaisseurs de nappe liquide qui ont été étudiées sont : $e_l = \{300\mu m, 450\mu m, 600\mu m\}$. Toutes les nappes ont une largeur¹ de $40mm$.

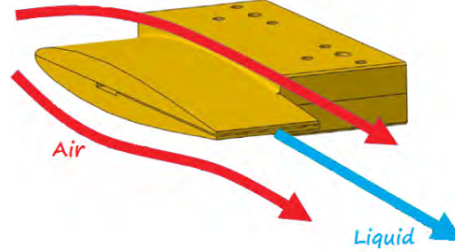


FIGURE 7.1 – Profil naca de l'injecteur.

La veine d'air

Pour produire l'écoulement gazeux, l'injecteur est placé dans une veine d'air de section carrée de $46mm$ de côté. Le contrôle du débit d'air entrant dans la veine d'air est effectué en amont grâce à des débitmètres. Les plus grosses structures turbulentes de l'écoulement d'air sont détruites dans une chambre de tranquillisation et un convergent situé en amont de la veine d'air (cf. Figure 7.2). Cette installation amont permet d'obtenir un écoulement stable, homogénéisé et laminaire à l'entrée de la veine d'air.

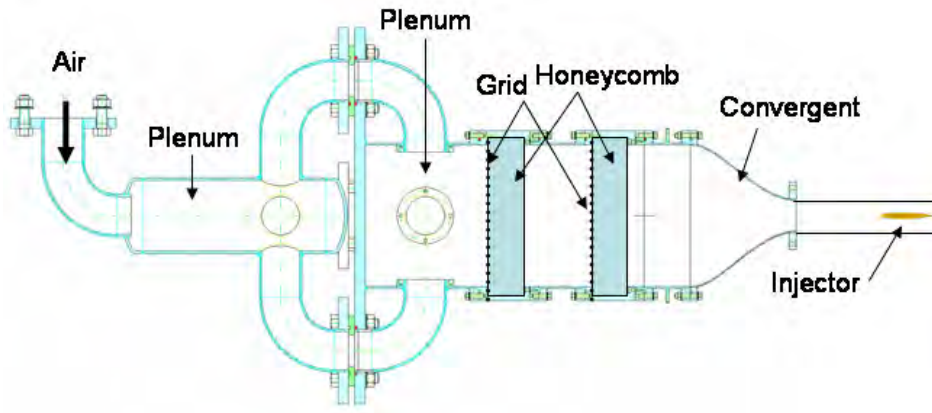


FIGURE 7.2 – Schéma global du banc d'essai SHAPE.

Modification de l'écoulement d'air. Afin de pouvoir étudier l'influence de l'écoulement d'air sur l'atomisation d'une nappe liquide cisailée, différentes cales ont été introduites dans la veine d'air. Ces cales permettent de faire varier la géométrie interne de la veine d'air et de modifier l'épaisseur de l'écoulement d'air à la sortie de celle-ci. On distingue deux catégories de cales (cf. Figure 7.3). La première catégorie, regroupant les cales à section trapézoïdale, permet d'obtenir une configuration géométrique divergente : la section de passage de l'air dans la veine diminue puis ré-augmente en sortie. La seconde catégorie, regroupant les cales à section triangulaire, permet d'obtenir une configuration géométrique convergente. Par

1. La largeur d'une nappe liquide désigne la dimension de la nappe liquide dans la direction transversale à l'écoulement liquide en sortie d'injecteur

convention, toutes les configurations géométriques sont désignées par une lettre, "C" pour les cas convergents ou "D" pour les cas divergents, suivies d'un nombre indiquant l'épaisseur en millimètre de l'écoulement d'air e_g de part et d'autre de l'injecteur à la sortie de la veine d'air. Par exemple, la configuration C_9 correspond à une configuration convergente où l'épaisseur de l'écoulement d'air vaut $e_g = 9mm$.

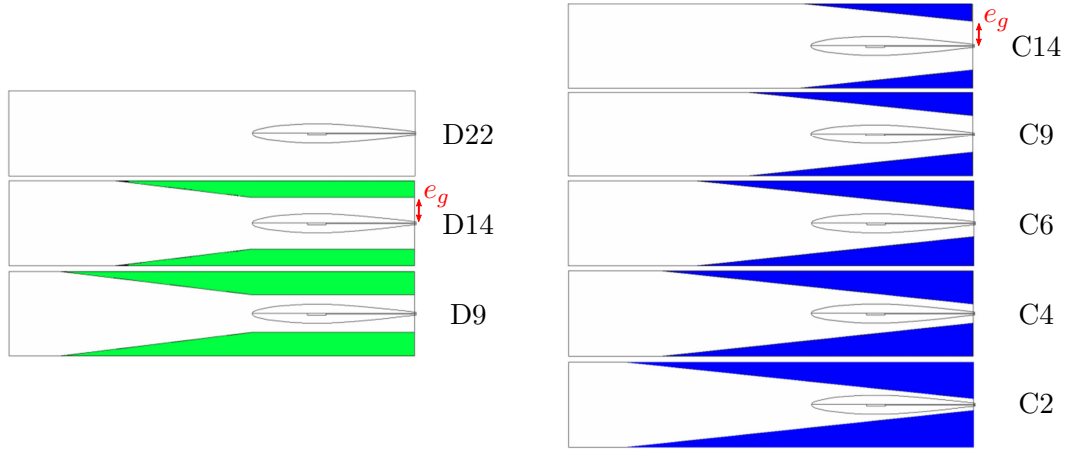


FIGURE 7.3 – Configurations obtenues en insérant différentes cales (en vert et en bleu) dans la veine d'air. Les configurations divergentes (D) sont à gauche et les configurations convergentes (C) à droite.

7.1.1.2 Conditions opératoires

Tous les essais ont été réalisés à température ambiante ($T_0 \approx 20^\circ C$) et pression atmosphérique ($p_0 \approx 1000$ hPa). Les fluides utilisés sont de l'air pour le gaz et de l'eau pour le liquide. Les propriétés de ces deux fluides sont rappelées dans le [Tableau 7.1](#).

Fluide	ρ_0 ($kg.m^{-3}$)	μ_0 ($Pa.s$)	c_0 ($m.s^{-1}$)	σ ($N.m^{-1}$)
Air	1.22	$1.8 \cdot 10^{-5}$	340	0.072
Eau	1000	$1.0 \cdot 10^{-3}$	1480	

Tableau 7.1 – Propriétés de l'air et de l'eau

La gamme de vitesses d'air à la sortie de la veine s'étend de $20 m.s^{-1}$ à $90 m.s^{-1}$ et la gamme de vitesses du liquide à la sortie de l'injecteur s'étend de $0.3 m.s^{-1}$ à $4.4 m.s^{-1}$. La possibilité de modifier l'épaisseur de l'écoulement d'air et de faire varier les vitesses d'injection de chaque fluide permet d'explorer une large plage de fonctionnement comme en témoigne le [Tableau 7.2](#) où sont récapitulées les plages de variation de chaque nombre adimensionnel caractéristique.

	Re_g	Re_l	MFR	MR	We_{g,e_l}	We_{l,e_l}
Valeur Min.	250	100	0.027	0.18	1.2	1000
Valeur Max.	12000	1200	85	6250	31	26000

Tableau 7.2 – Plage de valeurs des nombres adimensionnels caractéristiques étudiés dans [27].

7.1.2 Principaux résultats expérimentaux disponibles

L'étude de Déjean [27] fournit une importante base de données. On présente ici les principaux résultats qui ont été exploités pour évaluer la validité de ceux obtenus par simulations numériques.

Caractérisation de l'écoulement du gaz

Les premières données concernent la caractérisation de l'écoulement du gaz en sortie de la veine d'air et en l'absence de liquide (cas monophasique). Des mesures ont été réalisées en utilisant un anémomètre à fil chaud à température constante (CTA) pour caractériser la couche limite au niveau des lèvres de l'injecteur en sortie de la veine d'air. Ces mesures montrent que la couche limite d'air sur le profil NACA de l'injecteur dépend fortement du type de cale introduite dans la veine d'air. Pour une géométrie convergente, la couche limite à la paroi correspond à un profil laminaire alors que dans le cas d'une géométrie divergente la couche limite correspond à un profil turbulent. Par exemple, la Figure 7.4b montre les résultats des mesures effectuées pour la configuration C₉ et D₉ où on observe un profil de couche limite laminaire et turbulent, respectivement.

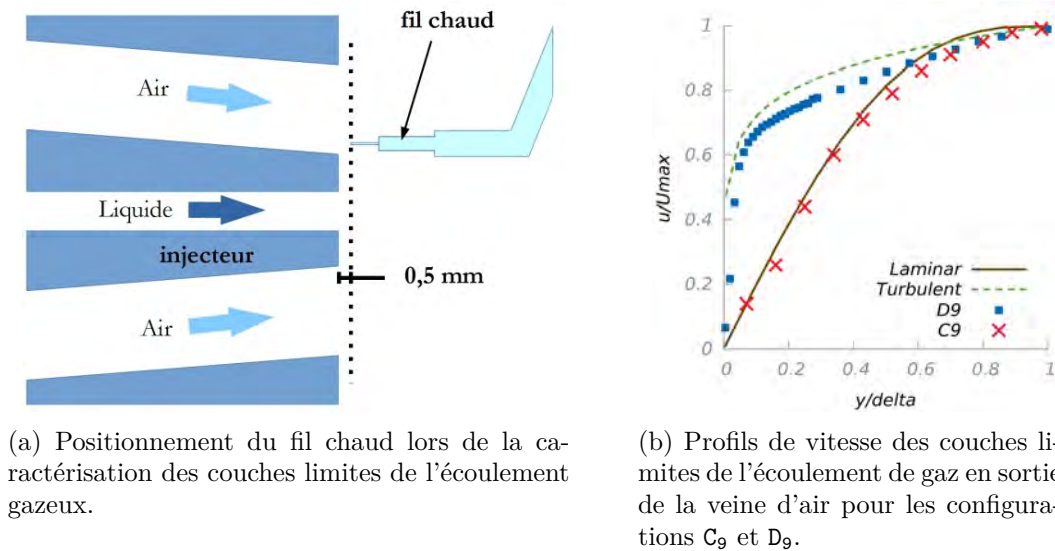


FIGURE 7.4 – Caractérisation des couches limites de l'écoulement de gaz à la sortie de la veine d'air [27].

Les champs de vitesses moyennes et RMS de l'écoulement d'air ont aussi été mesurés dans plusieurs sections en aval de l'injecteur. Ces mesures ont été réalisées à la fois avec un anémomètre à fil chaud CTA et par *Anémométrie Laser Doppler* (LDA, en anglais). La campagne de mesure par LDA a permis d'obtenir les profils moyens et RMS pour les composantes longitudinales et verticales de la vitesse dans chaque plan de mesure.

Visualisation globale de la nappe liquide

Des visualisations globales de la rupture de la nappe liquide en fonction des conditions d'injection ont été faites afin de pouvoir observer et identifier les mécanismes mis en jeu. Il est alors possible d'identifier qualitativement les différents régimes d'atomisation comme cela a été proposé par Gutierrez Fernandez *et al.* [43].

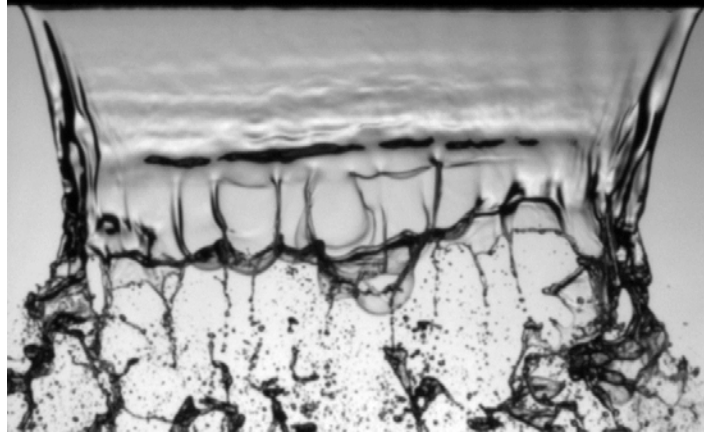


FIGURE 7.5 – Vue de dessus d'une nappe liquide cisailée obtenue par ombroscopie [27].

Longueur de rupture moyenne du cœur liquide

Déjean [27] a obtenu expérimentalement les longueurs de rupture moyennes du cœur liquide en utilisant une méthode de fluorescence planaire induite par laser (PLIF) et des algorithmes de post-traitement d'image. La méthode consiste à créer une nappe laser qui va illuminer une section 2D au milieu de la nappe liquide (cf. Figure 7.6). La lumière ré-émise par la fluorescéine présente dans le liquide est capturée par une caméra située à la verticale de la nappe liquide. La caméra est équipée d'un filtre permettant d'éliminer les longueurs d'ondes correspondant à des réflexions parasites de la nappe laser sur la surface de la nappe liquide. Après l'acquisition, un algorithme de post-traitement opère sur la vidéo enregistrée par la caméra afin d'identifier le cœur liquide et de calculer sa longueur moyenne.

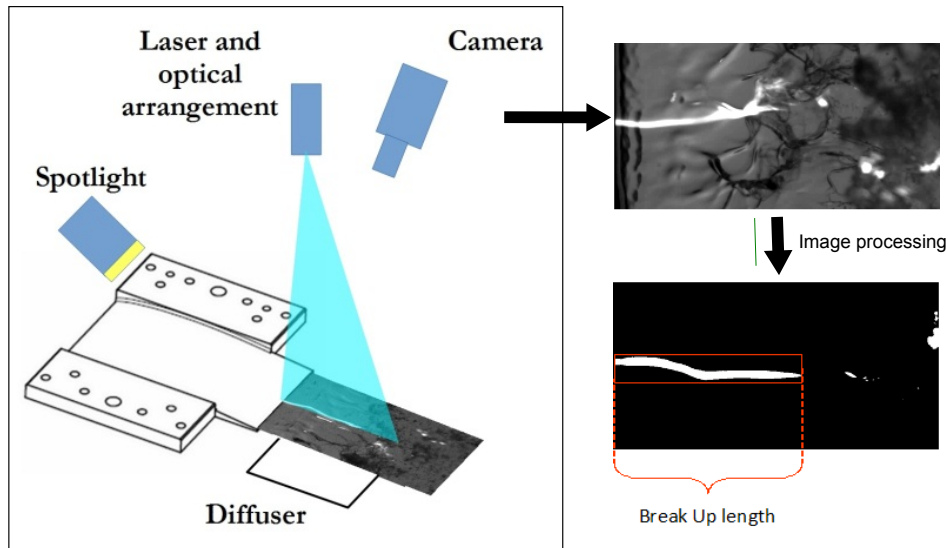


FIGURE 7.6 – Protocole expérimental utilisé dans [27] pour la mesure de la longueur de rupture moyenne du cœur liquide.

Ce protocole expérimental a été appliqué pour mesurer la longueur de rupture moyenne du cœur liquide pour toutes les configurations géométriques (variation de l'épaisseur du gaz et de l'épaisseur du liquide) et toutes les conditions d'injection (variation de la vitesse du gaz et du liquide). La Figure 7.7 montre un exemple parmi les résultats obtenus où on peut observer que, quelque soit la configuration géométrique, la longueur de rupture moyenne du

cœur liquide diminue lorsque la vitesse d'injection du liquide est fixée et que celle du gaz augmente.

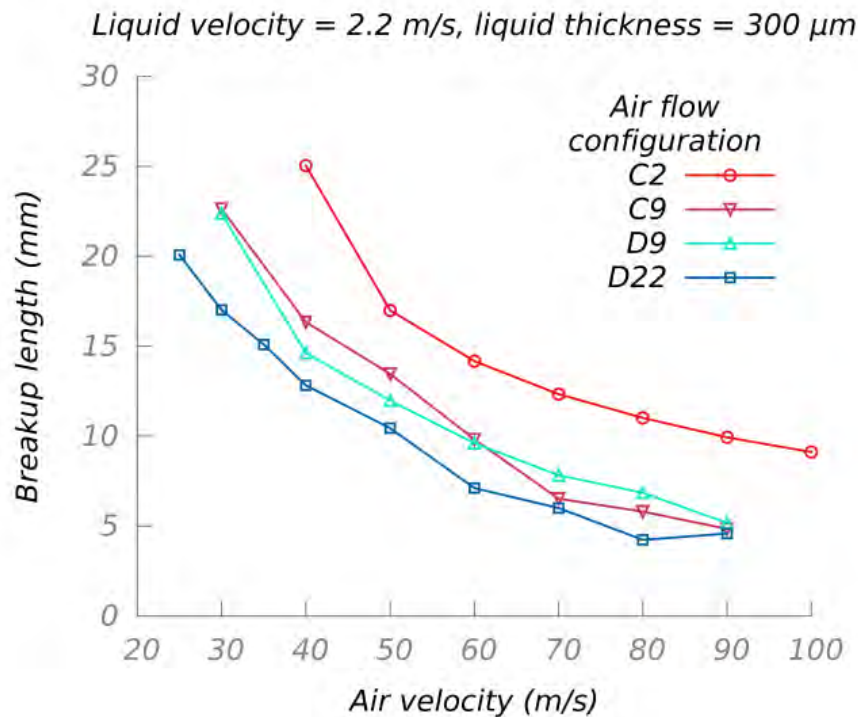


FIGURE 7.7 – Évolution de la longueur de rupture du cœur liquide en fonction de la vitesse d'air pour différentes configurations géométriques (extrait de [27]).

Fréquence de battement longitudinale

La fréquence de battement longitudinale de la nappe liquide a été mesurée expérimentalement en utilisant la méthode PLIF décrite au paragraphe précédent. Toutefois, une caméra rapide a été utilisée dans ce cas pour garantir une résolution temporelle suffisante. La caméra est placée sur le côté de la nappe liquide (dans un plan légèrement incliné par rapport au plan de la nappe liquide) de sorte qu'elle soit pratiquement à la verticale de la nappe laser. À partir des images instantanées de la section de la nappe liquide, un algorithme calcule l'évolution temporelle de l'amplitude de battement longitudinale de la nappe liquide en repérant sa position sur chaque image pour une abscisse donnée. Ensuite, la fréquence de battement est déterminée en calculant la transformée de Fourier rapide (FFT) du signal d'amplitude. La Figure 7.8 récapitule le protocole expérimental.

Granulométrie

Des mesures ont été effectuées pour obtenir la distribution en taille des structures liquides produites par atomisation. Deux méthodes de mesure ont été utilisées en fonction de la distance de la zone ciblée par rapport à l'injecteur :

- ▷ Dans la zone d'atomisation primaire, située proche de l'injecteur, le liquide est présent sous forme d'amas liquides non-sphériques. Dans ces conditions, il n'est pas possible d'utiliser les méthodes conventionnelles de mesure par diffraction laser qui ne sont applicables que pour des gouttes sphériques. La méthode retenue est basée sur l'acquisition d'images suivies d'un post-traitement permettant d'identifier les structures

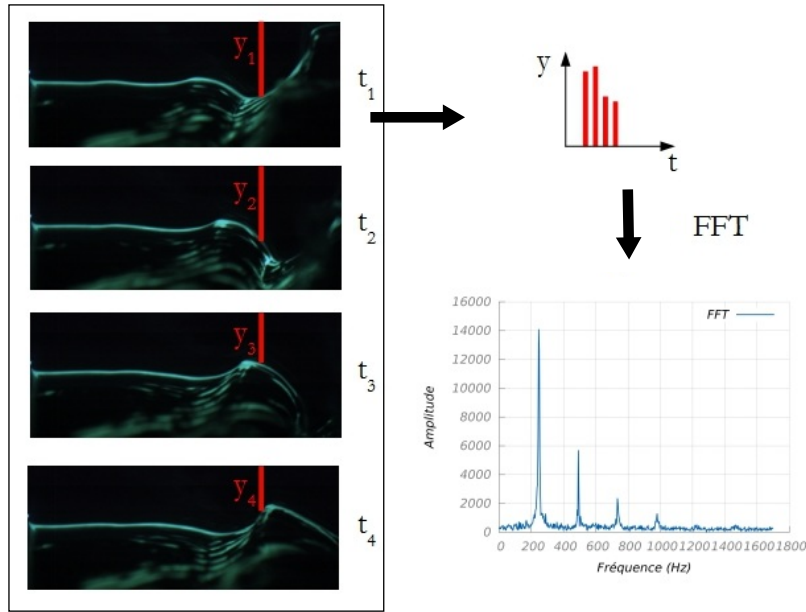


FIGURE 7.8 – Protocole expérimental utilisé dans [27] pour la détermination de la fréquence de battement longitudinale de la nappe liquide.

liquides situées dans le plan focal (plan de netteté). Cette méthode permet d'estimer le diamètre moyen de Sauter de chaque structure liquide à partir de la surface de la structure liquide contenue dans le plan d'une image.

- ▷ Dans la zone située plus en aval de l'injecteur, la distribution en taille des gouttes du spray final a été mesurée en utilisant le système à diffraction laser *Spraytec* de la société Malvern Instruments. Dans cette région de l'écoulement, cet appareil peut être utilisé car il est raisonnable de faire l'hypothèse que les gouttes soient suffisamment stables et sphériques après que l'atomisation secondaire ait eu lieu.

7.2 Simulations 2D de nappes liquides planes cisillées.

Bien que la formation de ligaments et de gouttes soit liée à la croissance d'instabilités tri-dimensionnelles, on fait l'hypothèse que le comportement à grandes échelles du cœur liquide d'une nappe liquide plane cisillée est essentiellement piloté par le développement d'instabilités 2D dans le sens de l'écoulement. La simulation 2D doit alors permettre de décrire, dans une certaine mesure, l'évolution du cœur liquide.

Dans cette partie nous présentons les simulations réalisées pour des configurations 2D correspondant aux configurations expérimentales décrites précédemment (cf. §7.1). Dans un premier temps, celles-ci ont été effectuées avec le modèle bifluide uniquement. L'objectif de ces simulations est d'évaluer la capacité de ce modèle à décrire l'évolution "macroscopique" du cœur liquide en fonction de la configuration géométrique et des conditions opératoires. Cette évaluation a été faite en comparant des grandeurs caractéristiques du cœur liquide (telles que la longueur de rupture moyenne et la fréquence de battement) obtenues numériquement et expérimentalement.

Dans un second temps, la méthode de couplage multi-échelle (cf. chapitre §6) a été mise en œuvre pour plusieurs cas de simulation 2D afin de simuler le processus complet d'atomisation (de l'injection du liquide à l'obtention du spray). Ces simulations ont permis de valider le fonctionnement de la méthodologie de couplage et d'étudier qualitativement l'influence des

conditions opératoires sur les sprays générés.

7.2.1 Paramètres numériques

7.2.1.1 Configurations géométriques

Pour les simulations 2D, les géométries retenues correspondent au plan médian de l'ensemble constitué de la veine d'air et de l'injecteur (cf. [Figure 7.9](#)). Les éléments du banc d'essai situés en amont de la veine d'air n'ont donc pas été pris en compte dans le domaine de simulation. La géométrie extérieure de la veine d'air a été simplifiée en modélisant son profil extérieur par un cylindre à base circulaire.

Les simulations 2D ont été réalisées pour les configurations géométriques suivantes :

- ▷ configuration convergente C_9 .
- ▷ configuration divergente D_{22} .

Ces deux configurations ont été choisies afin d'évaluer la capacité des simulations à reproduire le comportement de la nappe liquide en fonction de la géométrie. Pour chaque géométrie, nous avons retenu la configuration pour laquelle la base de données expérimentales est la plus complète.

Pour ces deux configurations, l'épaisseur de la nappe liquide injectée a été fixée à $e_l = 300\mu m$.

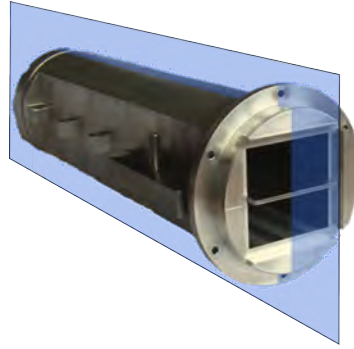


FIGURE 7.9 – Plan médian correspondant à la configuration 2D.

7.2.1.2 Maillages

La [Figure 7.10](#) montre une vue globale d'un des maillages utilisés pour la configuration D_{22} (le maillage pour la configuration C_9 est similaire). À la sortie de l'injecteur, dans la zone où le cœur liquide de la nappe est présent, le maillage a été raffiné avec un pas d'espace de référence égal à $\Delta x_{inj.} = 30\mu m$. Dans la suite du manuscrit, on se référera à cette résolution avec la notation " N_{10} " car celle-ci correspond à 10 points dans l'épaisseur de la nappe. Afin que l'évolution du cœur liquide de la nappe soit relativement bien capturée par le modèle à phases séparées, cette zone de raffinement a été étendue en aval du point d'injection sur un domaine de taille $L_{inj.} \times l_{inj.}$ (cf. [Figure 7.10](#)). Ces valeurs sont définies différemment selon les configurations.

Pour la configuration C_9 , l'ensemble des paramètres du maillage de référence est donné dans le [Tableau 7.3](#). La zone de raffinement au niveau du point d'injection a été (sur)dimensionnée en se basant sur la valeur maximale de L_b^{exp} obtenue pour l'ensemble des régimes d'injection étudiés, où L_b^{exp} est la longueur moyenne de rupture de la nappe mesurée expérimentalement. Ceci a permis d'obtenir un maillage unique et résolu sur une zone assez étendue pour pouvoir étudier toutes la gamme de régimes d'injection.

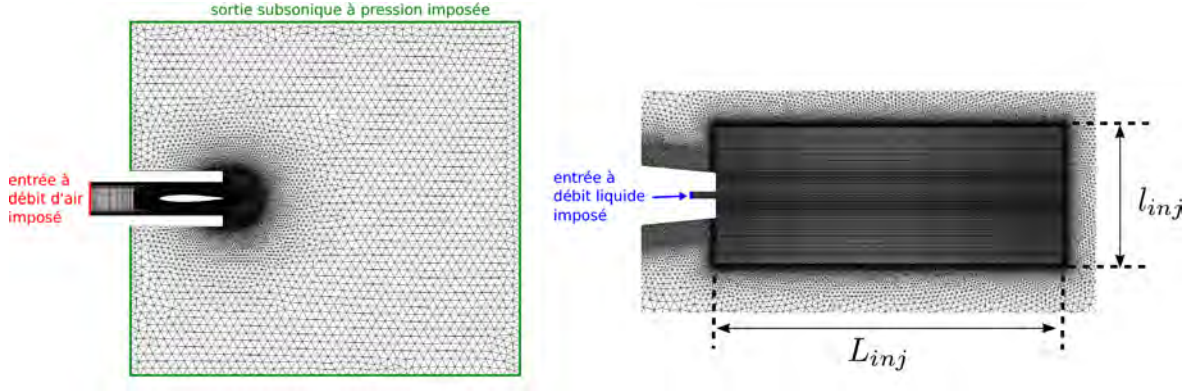


FIGURE 7.10 – Visualisation d'un des maillages 2D utilisé pour la configuration D₂₂. À droite : vue globale. À gauche : zoom sur la zone plus résolue en aval du point d'injection de la nappe liquide.

Pour étudier la convergence en maillage, nous avons également effectué des simulations en utilisant un maillage N_{20} deux fois plus résolu dans la zone d'injection (ce qui correspond à 20 points dans l'épaisseur de la nappe). Les résultats présentés dans la suite du manuscrit pour la configuration C₉ correspondent par défaut au maillage de référence, sauf mention contraire.

Résolutions :		N_{10}	N_{20}
L_{inj}	[mm]	30	30
l_{inj}	[mm]	10	10
Δx_{inj}	[μm]	30	15
nb de cellules \mathcal{N}_c	–	0.6M	0.9M
Δt (diph., CFL=0.45)	[s]	$\approx 3E-8$	$\approx 1.5E-8$

Tableau 7.3 – Paramètres numériques liés aux maillages N_{10} et N_{20} utilisés dans les configurations C₉[V₃₀-V₅₀-V₈₀].

Pour la configuration D₂₂, contrairement au cas C₉, nous avons adapté la dimension de la zone de raffinement en aval du point d'injection en fonction du régime d'injection étudié afin de minimiser le nombre total de cellules des maillages. Nous verrons dans le paragraphe suivant que les régimes d'injection étudiés correspondent à trois vitesses d'air : $V_g^{max} = 30m/s, 50m/s, 80m/s$. Connaissant la valeur de L_b^{exp} pour chaque régime, nous avons choisi $L_{inj} \approx 1.5 L_b^{exp}$ pour garantir que le coeur liquide évolue bien dans la zone raffinée du maillage. Les paramètres des trois maillages ainsi obtenus sont donnés dans le [Tableau 7.4](#).

7.2.1.3 Régimes de fonctionnement étudiés

Pour les deux configurations géométriques considérées, l'épaisseur de la nappe liquide est fixée à :

$$e_l = 300\mu m$$

Pour une configuration géométrique donnée, les conditions opératoires sont alors uniquement caractérisées par les débits d'injection du gaz dans la veine d'air et du liquide à la sortie de l'injecteur.

Maillages D22		$V_g^{max} [m.s^{-1}]$		
		30	50	80
$L_{inj.}$	$[mm]$	22	15	8
$l_{inj.}$	$[mm]$	8	6	4
$\Delta x_{inj.}$	$[\mu m]$	30	30	30
nb de cellules \mathcal{N}_c	—	292K	181K	117K
Δt (diph., CFL=0.45)	$[s]$	$\approx 3.0E-8$		

Tableau 7.4 – Paramètres numériques liés aux 3 maillages utilisés selon la vitesse V_g^{max} dans la configuration D22.

Conditions d'injection du gaz

Comme dans l'étude expérimentale de Déjean [27], l'évolution de la longueur de rupture moyenne et de la fréquence de battement de la nappe liquide a été étudiée en fonction de la valeur maximale de la vitesse de l'écoulement d'air V_g^{max} en sortie de la veine d'air (cf. Figure 7.11). Pour les deux configurations géométriques (C₉ et D22), trois vitesses d'air V_g^{max} ont été étudiées : $V_g^{max} = \{30m.s^{-1}, 50m.s^{-1}, 80m.s^{-1}\}$. On se réfère respectivement à ces trois vitesses d'injection en adoptant la notation V₃₀, V₅₀ et V₈₀ pour la désignation de la configuration. Ainsi, la désignation C₉V₃₀N₁₀ signifie qu'on considère le cas de la configuration convergente avec une épaisseur d'air $e_g = 9mm$, avec une vitesse d'air $V_g^{max} = 30m.s^{-1}$ et un maillage correspondant à une résolution de 10 points dans l'épaisseur de la nappe.

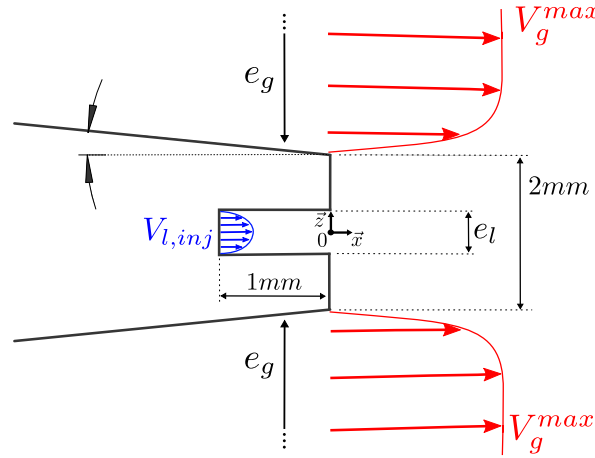


FIGURE 7.11 – Configuration en sortie d'injecteur.

Pour réaliser ces simulations, il a été nécessaire d'estimer les débits massiques de gaz en 2D correspondants aux débits expérimentaux utilisés en 3D. Si on imposait directement les valeurs des débits d'air injectés expérimentalement dans la veine d'air, la valeur numérique de V_g^{max} obtenue en sortie de la veine d'air serait sous-estimée compte-tenu du fait que les simulations 2D ne permettent pas de prendre en compte les couches limites qui se développent sur les parois latérales de la veine et qui contribuent à une réduction la section débitante. Pour obtenir numériquement les valeurs V_g^{max} , la valeur du débit massique de gaz à injecter à l'entrée de la veine d'air a été estimée de manières différentes selon les informations dont nous disposions lors de la mise en données des calculs :

- ▷ Pour la configuration C₉, nous avons intégré les profils de vitesses mesurées expérimentalement dans le plan médian situé en sortie de la veine d'air afin de déterminer

la vitesse débitante dans ce plan 2D. Ensuite, sachant que les effets de compressibilité du gaz sont négligeables ($\rho_g \approx \rho_{0,g}$), nous en avons déduit le débit massique de gaz à injecter \dot{M}_g^{2D} .

- ▷ Pour la configuration D₂₂, nous ne disposons pas des données expérimentales lors de la mise en données². Nous avons donc estimé le débit d'entrée en multipliant la vitesse V_g^{max} désirée par le rapport des sections 2D de la veine d'air entre l'entrée et la sortie (en prenant en compte des couches limites estimées à 1.5mm en sortie).

Les débits surfaciques de masse de gaz \dot{M}_g^{2D} utilisés pour les simulations 2D sont donnés dans le [Tableau 7.5](#), en fonction de la configuration géométrique et des différentes vitesses V_g^{max} étudiées. Ces débits sont imposés avec un profil uniforme en entrée de la veine d'air. Les vitesses maximales du gaz $V_g^{max,2D}$ obtenues par les simulations sont données dans le [Tableau 7.5](#). L'écart relatif entre V_g^{max} et $V_g^{max,2D}$ est inférieur à 5% dans la plupart des cas, ce qui est acceptable.

		C ₉ V ₃₀	C ₉ V ₅₀	C ₉ V ₈₀	D ₂₂ V ₃₀	D ₂₂ V ₅₀	D ₂₂ V ₈₀
\dot{M}_g^{2D}	$[kg.s^{-1}.m^{-2}]$	13.9	23.7	38.9	31.1	51.4	82
$\dot{V}_g^{max,2D}$	$[m.s^{-1}]$	31	52	84	29	46	74

Tableau 7.5 – Débits surfaciques de masse de gaz \dot{M}_g^{2D} imposés en entrée de la veine d'air et vitesses maximales de l'écoulement de gaz en sortie de veine obtenues avec les simulations 2D des différentes configurations.

Conditions d'injection du liquide

Pour toutes les simulations réalisées, la vitesse débitante de l'eau liquide a été fixée à $V_{l,inj}^{moy} = 2.2 m.s^{-1}$. Le nombre de Reynolds lié à l'écoulement liquide dans la fente de l'injecteur est modéré ($Re_l \approx 660$). On impose alors un profil de Poiseuille pour la vitesse du liquide en sortie de l'injecteur (dans la fente). En utilisant les notations de la [Figure 7.11](#), l'expression de la vitesse d'injection du liquide s'écrit :

$$\forall y \in \left[-\frac{e_l}{2}, \frac{e_l}{2}\right], \quad V_{l,inj}(y) = \frac{3}{2} V_{l,inj}^{moy} \left(1 - \left(\frac{2y}{e_l}\right)^2\right) \quad (7.1)$$

où y est l'ordonnée par rapport un centre de la fente (cf. [Figure 7.11](#)).

7.2.1.4 Récapitulatif des simulations effectuées

De nombreuses simulations ont été effectuées au cours de cette étude 2D. Afin de donner une vision globale de celle-ci, nous avons récapitulé dans le [Tableau 7.6](#), l'ensemble des cas de simulation qui ont été réalisés . La matrice obtenue indique les maillages utilisés pour les cas qui ont été retenus.

7.2.2 Résultats des simulations 2D monophasiques

Avant d'entreprendre les simulations de l'atomisation d'une nappe liquide, des simulations monophasiques ont été réalisées afin d'évaluer la capacité du modèle biffuide à décrire l'aérodynamique de l'écoulement gazeux dans la veine d'air et en aval de l'injecteur, ainsi que d'estimer les éventuels effets de l'approximation 2D sur l'écoulement gazeux. Dans cette

2. Les données sont actuellement disponibles.

		Vitesses gaz		
		V ₃₀	V ₅₀	V ₈₀
C ₉	mono.	—	N ₁₀ , N ₂₀	—
	diph.	N ₁₀	N ₁₀ , N ₂₀	N ₁₀
	diph.+spray	—	—	—
D ₂₂	mono.	—	N ₁₀	—
	diph.	N ₁₀	N ₁₀	N ₁₀
	diph.+spray	N ₁₀	N ₁₀	N ₁₀

Tableau 7.6 – Matrice des cas de simulation 2D. Légende : "mono" = simulation monophasique, "diph" = simulation diphasique du cœur liquide (sans couplage), "diph+spray" = simulation diphasique complète avec couplage.

sous-partie, nous présentons donc les résultats des simulations numériques monophasiques effectuées pour $V_g^{max} = 50m/s$ avec les configurations C9 et D22. Ces résultats sont comparés à ceux obtenus expérimentalement.

7.2.2.1 Champs instantanés

Sur la [Figure 7.12](#), les champs de vorticit  de l' coulement gazeux sont repr sent s. Pour les deux configurations g om triques, on observe un d tachement p riodique de tourbillons dans le sillage du culot de l'injecteur cr ant une all e de Von-Karman. Sur les c t s ext rieurs du jet d'air, on observe  galement des tourbillons g n r s par une d stabilisation de la couche de m lange entre le jet d'air   grande vitesse et le milieu ambiant au repos (instabilit  de type Kelvin-Helmholtz).

On remarque  galement pour la configuration D22 une apparition de tourbillons dans la section divergente de la veine d'air. Nous verrons plus en d tail dans les paragraphes suivants que ces tourbillons sont g n r s par le d collement des couches limites.

7.2.2.2 Champs moyens

Les moyennes temporelles des champs de pression et de vitesse de l' coulement gazeux ont  t  calcul es pour les configurations C₉V₅₀[N₁₀–N₂₀] et D₂₂V₅₀N₁₀.

Temps caract ristiques de l' coulement et calcul des moyennes temporelles

Le temps T_{avg} sur lequel les champs ont  t  moyenn s a  t  choisi tel que celui-ci soit grand devant :

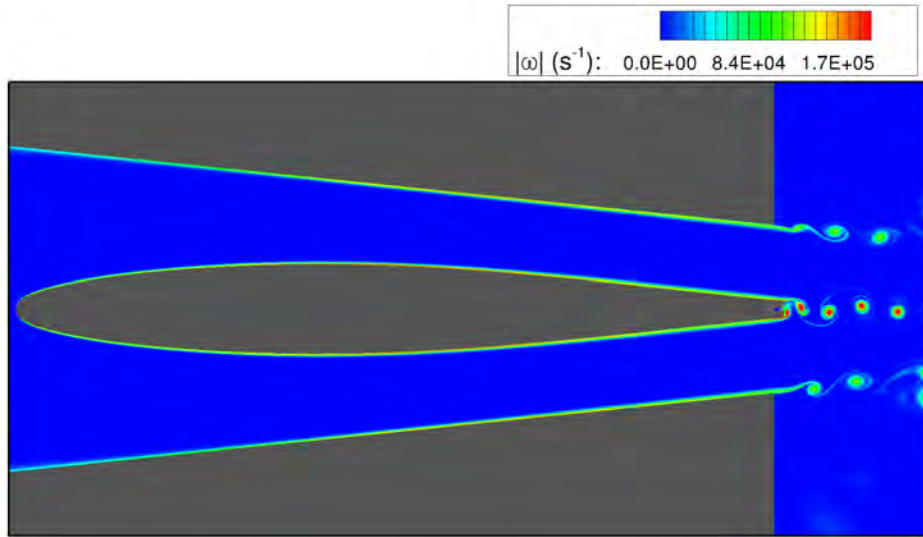
- ▷ La p riode de d tachement des tourbillons de Von-Karman τ_{VK} :

$$\tau_{VK} = \frac{1}{f_{VK}} = 0.238 \text{ ms} \quad (7.2)$$

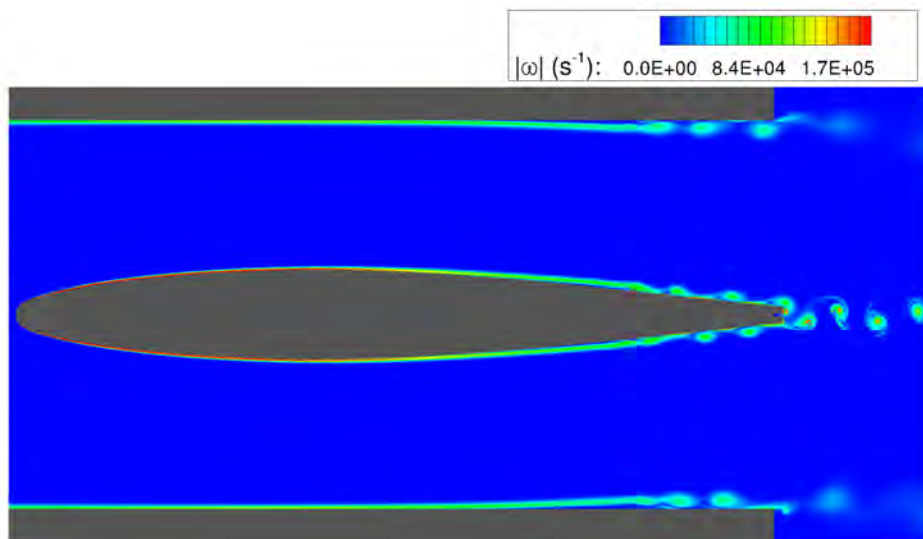
o  f_{VK} est la fr quence de d tachement des tourbillons. Le calcul de cette valeur est d taill  dans le paragraphe [§7.2.2.3](#)

- ▷ Le temps caract ristique de convection dans la veine d'air, not  τ_{conv} , correspondant au temps de s jour moyen du gaz dans la veine d'air. Celui-ci est exprim  par le rapport de la longueur de la veine L_{veine} et de la vitesse d bitante du gaz \bar{V}_g :

$$\tau_{conv} = \frac{L_{veine}}{\bar{V}_g} \approx \frac{L_{veine}}{V_g^{max}} = 4 \text{ ms} \quad (7.3)$$



(a) Configuration $C_9V_{50}N_{10}$



(b) Configuration $D_{22}V_{50}N_{10}$

FIGURE 7.12 – Champs instantanés de la vorticit  de l' coulement gazeux dans la veine d'air obtenus par les simulations 2D monophasiques.

Les valeurs de T_{avg} utilisées en pratique pour le calcul des champs moyens sont données dans le [Tableau 7.7](#). On vérifie bien que les valeurs de T_{avg} sont grandes devant les temps caractéristiques de l'écoulement, ce qui garantit la bonne convergence des valeurs moyennes de l'écoulement calculées dans la veine d'air et proche de la sortie de l'injecteur.

Paramètres	Unités	C ₉ V ₅₀ N ₁₀	C ₉ V ₅₀ N ₂₀	D ₂₂ V ₅₀
T_{avg}	[ms]	38.8	32.6	34.1
T_{avg}/τ_{VK}	—	163	137	143
T_{avg}/τ_{conv}	—	9.7	8.1	8.5

Tableau 7.7 – Temps T_{avg} durant lesquels sont moyennés les champs gazeux au cours des simulations monophasiques.

Observations qualitatives des champs moyens

La [Figure 7.13](#) et la [Figure 7.14](#) montrent les champs moyens de l'écoulement gazeux obtenus respectivement pour la configuration C₉V₅₀N₁₀ et la configuration D₂₂V₅₀N₁₀.

Pour les deux configurations, on observe une symétrie de l'écoulement moyen par rapport à l'axe $(0, X)$ ce qui est cohérent compte-tenu de la symétrie de la géométrie par rapport à ce même axe.

Pour le cas C₉V₅₀N₁₀, on observe une augmentation de la vitesse moyenne et une diminution de la pression moyenne entre l'entrée et la sortie de la veine, ce qui s'explique par la diminution de la section de passage dans la veine d'air (configuration convergente).

Pour la géométrie D₂₂V₅₀N₁₀, l'évolution de la section de passage dans la veine d'air est similaire à celle d'une tuyère : on a une diminution de la section de passage depuis l'entrée de la veine d'air jusqu'au col (où l'épaisseur du profil NACA de l'injecteur est maximale), puis une ré-augmentation de cette section jusqu'à la sortie de la veine d'air (zone du divergent). Les résultats des simulations montrent alors que le comportement de l'écoulement moyen est analogue à celui observé dans une tuyère pour un écoulement subsonique. Depuis l'entrée de la veine, la vitesse de l'air augmente et la pression diminue au fur et à mesure que l'on se rapproche du col. Ensuite, la vitesse de l'air diminue et la pression augmente du col vers la section de sortie de la veine d'air.

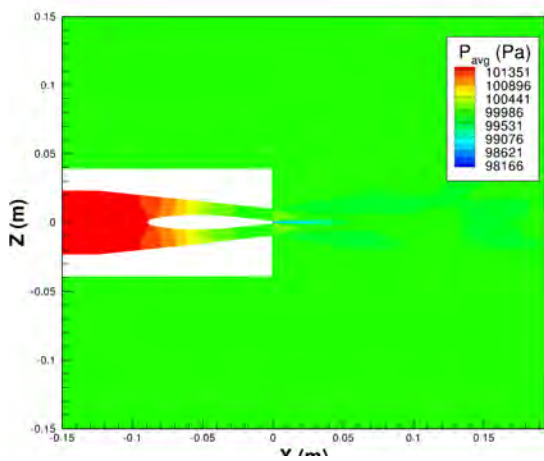
On observe également une petite zone de dépression située à la sortie de l'injecteur pour les deux configurations. Celle-ci témoigne de la présence d'une zone de recirculation attachée derrière le culot (en moyenne).

Étude des couches limites sur la paroi extérieure de l'injecteur

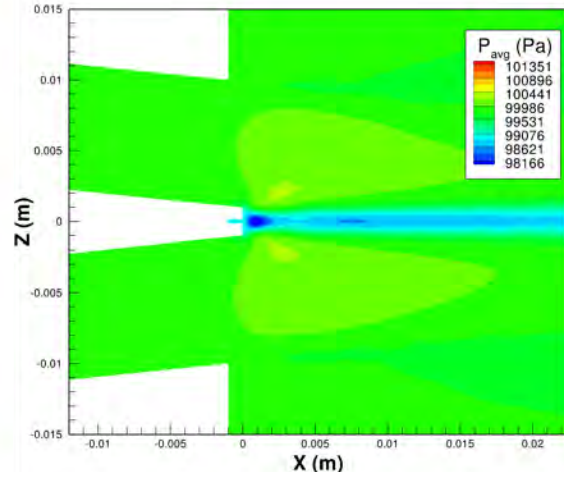
Expérimentalement, les couches limites se développant sur les parois du profil NACA ont été caractérisées en effectuant des mesures au fil chaud des profils de vitesse longitudinale dans un plan situé à une distance de $d = 0.6mm$ en aval du bord de fuite³. D'un point de vue numérique, il est possible d'extraire directement les profils de vitesse de l'écoulement sur la paroi extérieure de l'injecteur. En pratique, nous les avons extraits à une distance de $1mm$ en amont du bord de fuite ($d = -1mm$).

Afin d'identifier la nature laminaire ou turbulente de chaque couche limite, ces profils sont comparés à :

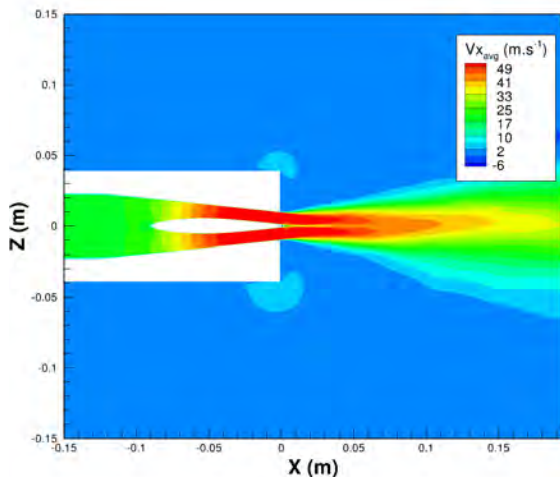
3. Dans l'étude expérimentale [27], les mesures n'ont pas été réalisées plus proche de l'injecteur afin de limiter les risques liés à une destruction accidentelle du fil chaud.



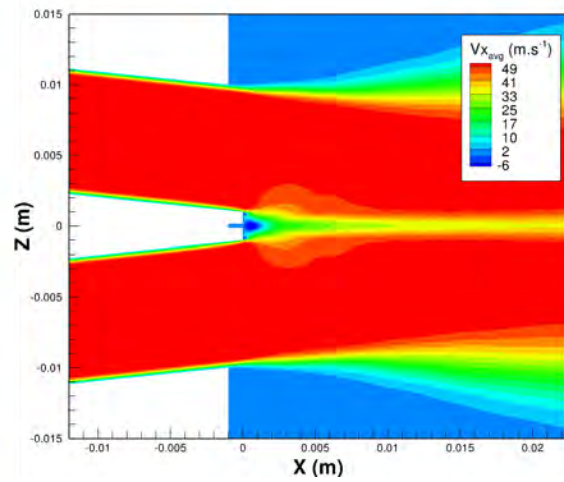
(a) Pression dans le domaine



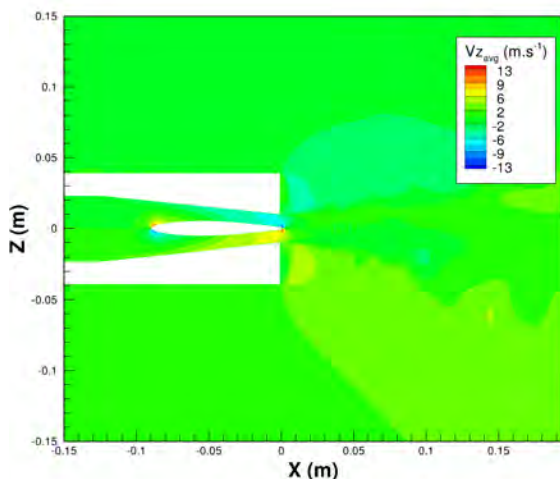
(b) Pression en sortie d'injecteur.



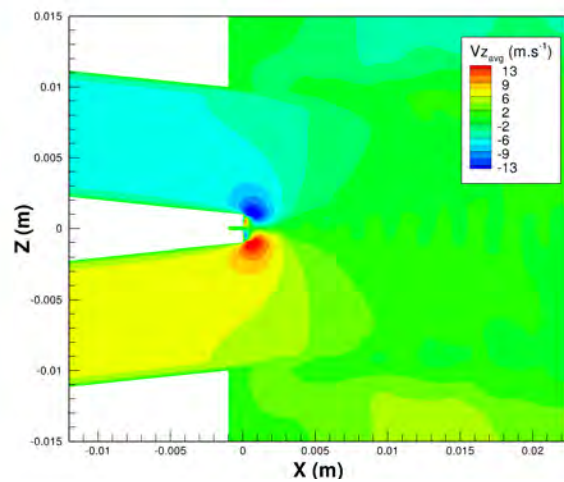
(c) Vitesse longitudinale dans le domaine.



(d) Vitesse longitudinale en sortie d'injecteur.

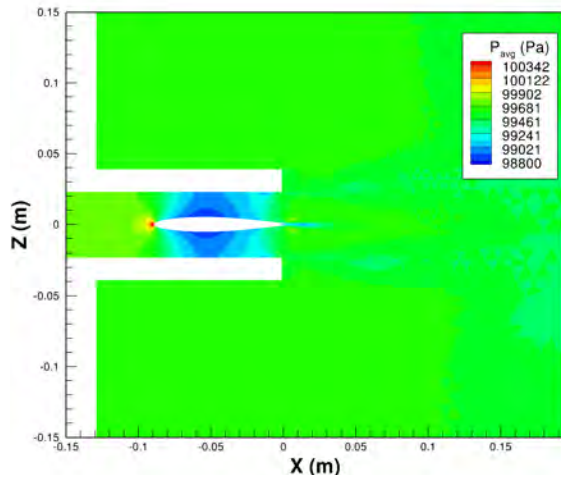


(e) Vitesse verticale dans le domaine.

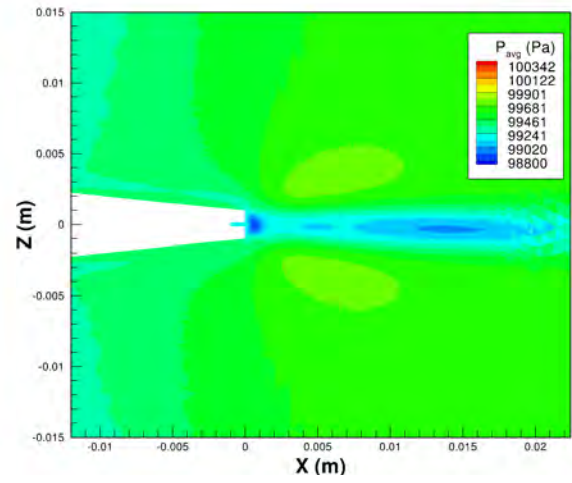


(f) Vitesse verticale en sortie d'injecteur.

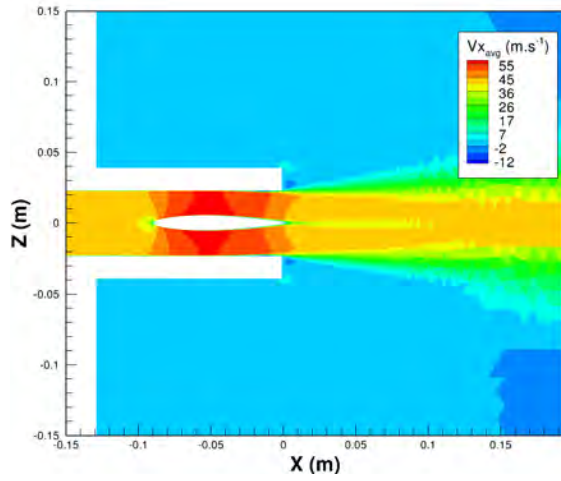
FIGURE 7.13 – Visualisation des champs moyens obtenus par simulation monophasique 2D dans la configuration $C_9V_{50}N_{10}$.



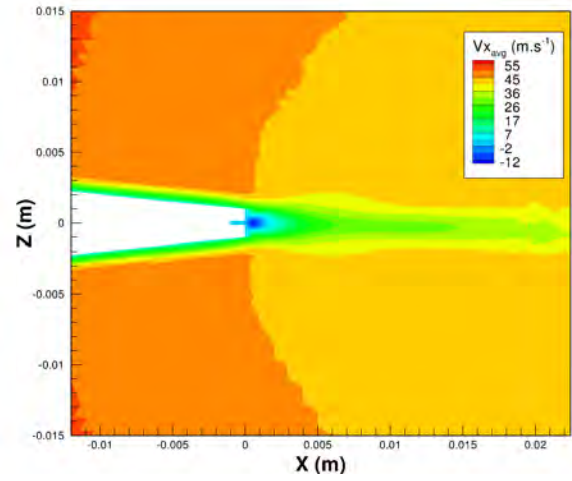
(a) Pression dans le domaine



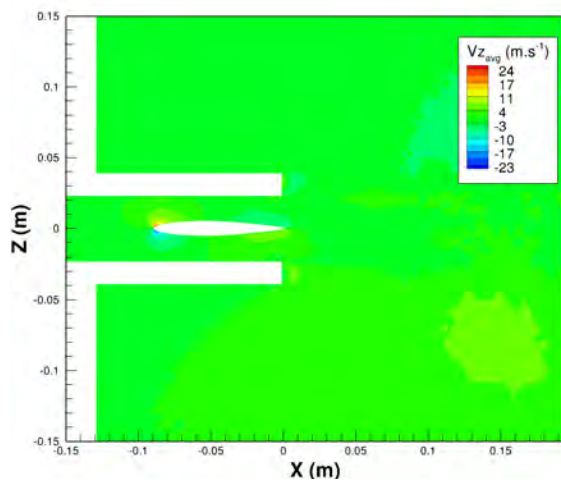
(b) Pression en sortie d'injecteur.



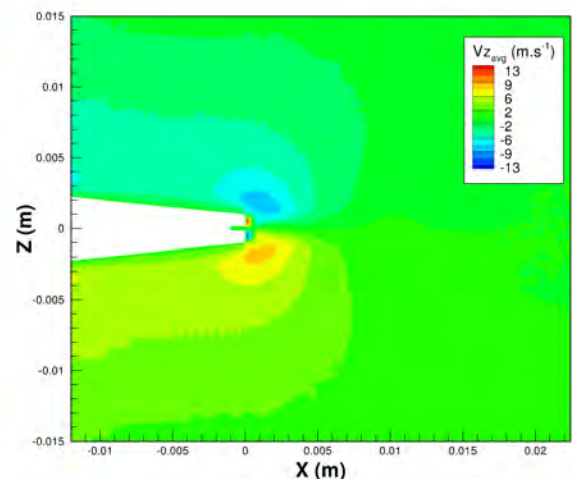
(c) Vitesse longitudinale dans le domaine.



(d) Vitesse longitudinale en sortie d'injecteur.



(e) Vitesse verticale dans le domaine.



(f) Vitesse verticale en sortie d'injecteur.

FIGURE 7.14 – Visualisation des champs moyens obtenus par simulation monophasique 2D dans la configuration $D_{22}V_{50}N_{10}$.

- ▷ une loi de profil de vitesse de type Pohlhausen (7.4) (en négligeant le terme dû au gradient de pression longitudinal) correspondant à une approximation d'un profil de couche limite laminaire sur plaque plane.

$$\text{Laminaire : } \frac{V_g(z)}{V_g^{max}} = 2 \left(\frac{z}{\delta_g} \right) - 2 \left(\frac{z}{\delta_g} \right)^3 + \left(\frac{z}{\delta_g} \right)^4 \quad (7.4)$$

- ▷ une loi de profil de vitesse en puissance $1/7^{\text{ème}}$ (7.5) correspondant à une approximation d'un profil de couche limite turbulente.

$$\text{Turbulent : } \frac{V_g(z)}{V_g^{max}} = \left(\frac{z}{\delta_g} \right)^{1/7} \quad (7.5)$$

Dans les expressions (7.4) et (7.5), le terme δ_g désigne l'épaisseur de la couche limite et V_g^{max} est, pour rappel, la vitesse maximale de l'écoulement (dans la section considérée).

Les résultats des comparaisons des profils adimensionnés des couches limites sont présentés sur la Figure 7.15 pour les deux cas étudiés :

- ▷ Pour la configuration convergente (cf. Figure 7.15a), on observe un très bon accord entre les résultats expérimentaux et les résultats de simulation. Les profils obtenus correspondent à un profil laminaire avec une épaisseur de couche limite de l'ordre de $\delta_g^{(exp.)} = \delta_g^{(simu.)} = 0.62mm$.
- ▷ Pour la configuration divergente (cf. Figure 7.15b), les mesures expérimentales montrent que le profil de vitesse dans la couche limite est pleinement turbulent en sortie de la veine d'air, avec une épaisseur $\delta_g^{(exp.)} = 2.1mm$. La nature turbulente de la couche limite s'explique dans ce cas par la présence d'un gradient de pression positif dans la zone divergente de la veine d'air qui favorise la déstabilisation et la transition de la couche limite de laminaire à turbulente.

D'un point de vue numérique, on constate que le profil obtenu correspond à une couche limite laminaire d'épaisseur $\delta_g^{(simu.)} = 1.7mm$. Ce désaccord avec les résultats expérimentaux s'explique par l'incapacité des simulations 2D à reproduire les mécanismes de transition conduisant à une couche limite turbulente (intrinsèquement 3D et nécessitant sans doute un maillage bien plus fin). L'augmentation de l'épaisseur de la couche limite laminaire obtenue pour la simulation du cas divergent est principalement due à un décollement de celle-ci en amont du point d'observation. Ce décollement, provoqué par le gradient de pression positif, se traduit sur l'écoulement moyen par la formation de bulbes de recirculation sur les parois convexes de l'injecteur et sur les parois planes de la veine d'air (cf. Figure 7.16). Ne disposant pas de données expérimentales sur le point de transition de la couche limite, il n'est pas possible de savoir si, en réalité, la transition a lieu au niveau des bulbes de recirculation (comme le laisse supposer les simulations 2D) ou si elle a lieu plus en amont (auquel cas, il y aurait peu de chance d'observer un décollement de la couche limite).

Finalement, la caractérisation des couches limites obtenues par la simulation des différentes configurations géométriques montre que l'approche 2D est valable dans le cas convergent où la couche limite est laminaire. Dans le cas divergent, celle-ci est discutable : il n'est pas possible d'obtenir une couche limite turbulente (même avec une résolution plus importante) à cause de la nature tridimensionnelle de la turbulence. Malgré ce désaccord, on note qu'on obtient tout de même, pour ce cas, un épaississement de la couche limite comme cela a été observé expérimentalement.

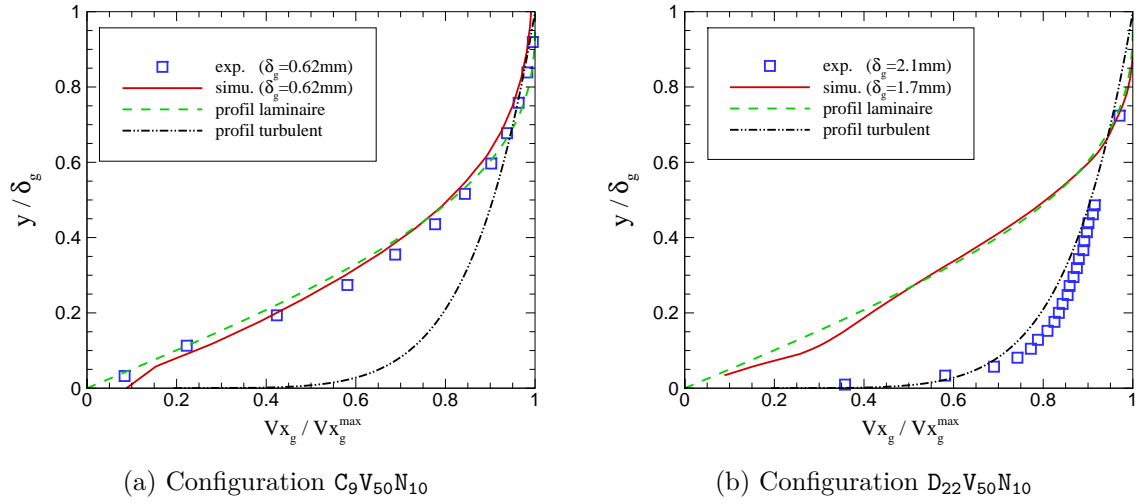


FIGURE 7.15 – Comparaison des profils de couche limite de l'écoulement d'air sur la paroi NACA de l'injecteur.

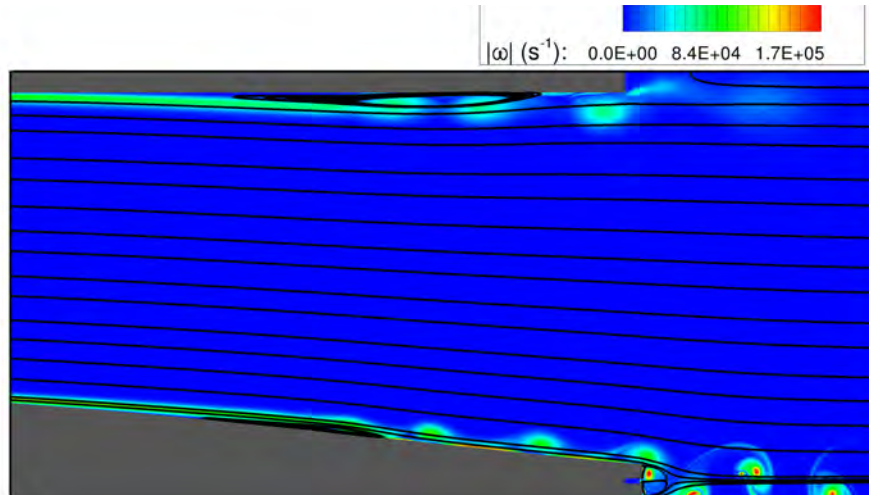


FIGURE 7.16 – Visualisation du décollement de la couche limite d'un des côtés de l'injecteur pour la configuration D₂₂V₅₀N₁₀ en monophasique. Légende : lignes de courant de l'écoulement moyen (en noir) superposées au champ de vorticité instantannée.

Comparaison des profils de vitesse en aval de l'injecteur

Les profils de vitesse ont été mesurés expérimentalement dans des plans situés à une distance $d = \{1.5mm, 5mm, 10mm, 20mm\}$ en aval de l'injecteur (cf. Figure 7.17).

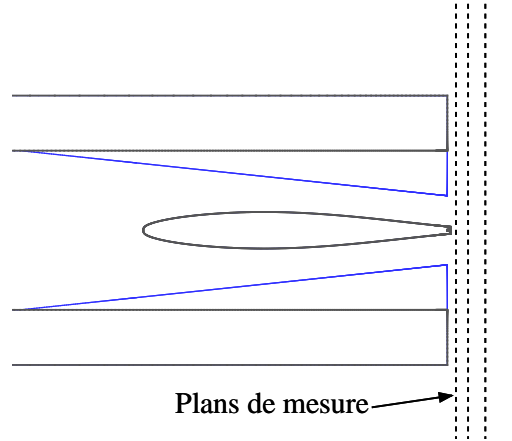


FIGURE 7.17 – Plans de mesure des profils de vitesse en aval de l'injecteur pour les deux configurations géométriques, positionnés à $d = \{1.5mm, 5mm, 10mm, 20mm\}$.

▷ Résultats pour la configuration C₉V₅₀

Pour la configuration C₉V₅₀, les profils de vitesses moyenne longitudinale et verticale sont comparés avec les résultats expérimentaux sur la Figure 7.18. On observe une bonne prévision de l'évolution du profil de vitesse longitudinale moyenne avec les simulations réalisées sur le maillage de référence N₁₀ et le maillage fin N₂₀. Toutefois, le déficit de vitesse longitudinale dans le sillage de l'injecteur est légèrement sous-estimé dans le premier plan de mesure quelque soit la résolution du maillage. On remarque également que le maillage fin N₂₀ permet de mieux décrire l'expansion du jet plus en aval de l'injecteur. Pour les profils de vitesse moyenne verticale, on observe des écarts plus importants entre les résultats numériques et expérimentaux. Notamment, le nombre de changement de signe dans la zone de recirculation derrière le culot de l'injecteur (plan de mesure à $d = 1.5mm$) est inférieur avec les deux maillages. Cet écart provient très probablement d'une sous-estimation de la longueur de la zone de recirculation moyenne derrière le culot. En effet, les profils de vitesse expérimentaux à $d = 1.5mm$ suggèrent que le premier plan de mesure est situé en amont des centres des deux tourbillons contra-rotatifs attachés au culot alors que les profils de vitesse obtenus par simulation suggèrent que les centres des tourbillons sont situés en aval de ce plan de mesure.

Les profils de vitesses RMS longitudinale et verticale ont également été comparés avec les résultats expérimentaux sur la Figure 7.19. On peut observer que les niveaux de fluctuation de vitesse sont globalement sur-estimés, surtout dans le sillage proche de l'injecteur. Toutefois, les positions des "pics", situés au niveau du sillage de l'injecteur et des couches de mélange externes du jet, sont relativement bien prévues par la simulation numérique. De plus, on constate que l'utilisation du maillage fin N₂₀ ne permet pas d'améliorer l'estimation des niveaux RMS dans le sillage de l'injecteur, ce qui suggère que les résultats sont déjà convergés dans cette zone avec le maillage de référence N₁₀.

▷ Résultats pour la configuration D₂₂V₅₀

Pour la configuration D₂₂V₅₀, les profils de vitesses moyennes longitudinale et verticale sont comparés avec les résultats expérimentaux sur la Figure 7.20. On rappelle que, pour cette configuration, la vitesse maximale du gaz obtenue par la simulation 2D ($V_g^{max,2D} = 46m/s$)

est légèrement inférieure à la vitesse expérimentale $V_g^{max} = 50m/s$ à cause des approximations sur le débit de gaz à imposer à l'entrée de la veine d'air (cf. paragraphe §7.2.1.3). Pour cette raison, nous avons également tracé les résultats expérimentaux obtenus pour la configuration D₂₂V₄₀ afin d'avoir un encadrement de la solution numérique. On observe un très bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux. L'évolution du déficit de la vitesse moyenne longitudinale et le changement de signe de la vitesse moyenne verticale dans le sillage de l'injecteur sont bien capturés par la simulation 2D.

Pour les profils de vitesses RMS longitudinale et verticale, la comparaison avec les résultats expérimentaux est faite sur la Figure 7.21. On observe de nouveau un bon accord entre les simulations numériques 2D et les mesures expérimentales, notamment pour les plans de mesure proches de l'injecteur. Plus en aval de l'injecteur, la simulation a tendance à surestimer les fluctuations de vitesse comme cela a été observé également pour le cas C₉V₅₀ précédent.

▷ Discussions

Pour les deux configurations géométriques, la surestimation des niveaux RMS des vitesses moyennes longitudinale et verticale est vraisemblablement liée aux limites de validité des simulations 2D. En effet, même s'il est acceptable de faire l'hypothèse que l'écoulement moyen est bidimensionnel, il est plus discutable de faire la même hypothèse pour les fluctuations de vitesse sachant que la turbulence est tridimensionnelle par nature. Dans ces conditions, les simulations 2D ne sont pas capables de reproduire les mécanismes permettant de "redistribuer" l'énergie de l'écoulement moyen dans la troisième dimension. Cette analyse pourrait être corroborée par des simulations 3D complètes de l'aérodynamique de la veine d'air et de l'injecteur.

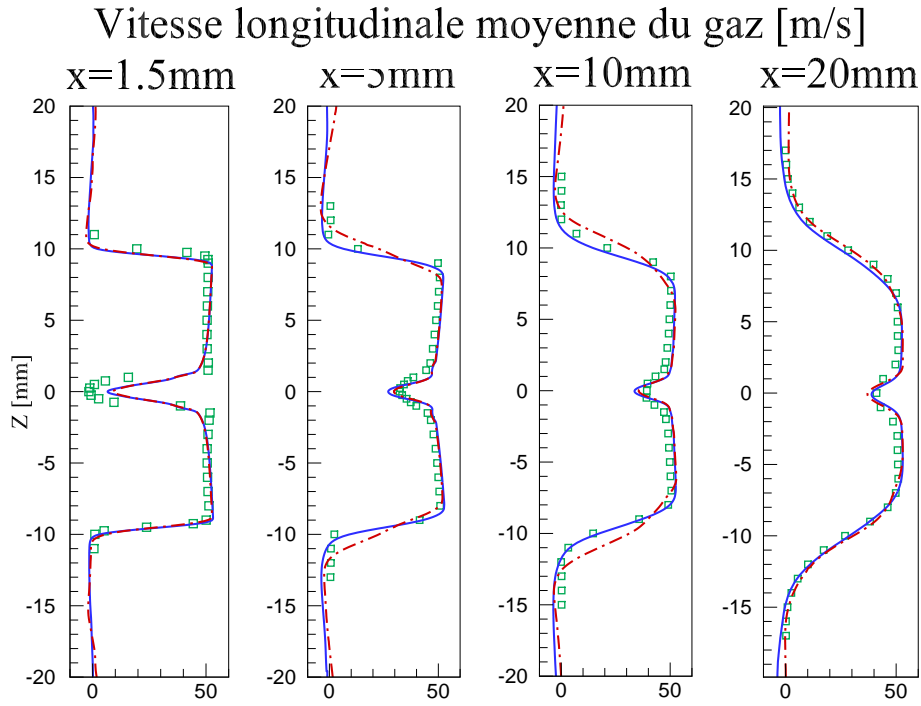
Pour la configuration D₂₂V₅₀, nous avons constaté un bon accord entre les résultats expérimentaux et numériques pour l'évolution des profils de vitesses moyennes et RMS en aval de l'injecteur et ce malgré une erreur importante sur la description de la couche limite de l'écoulement d'air sur la paroi de l'injecteur (cf. §7.2.2.2). Ceci montre que cette erreur a des conséquences limitées sur le développement de l'écoulement d'air dans la zone aval, c'est-à-dire dans la zone où l'écoulement interagit avec la nappe liquide lorsque celle-ci est présente. Cette étude a donc été poursuivie par des simulations 2D diphasiques.

7.2.2.3 Analyse fréquentielle

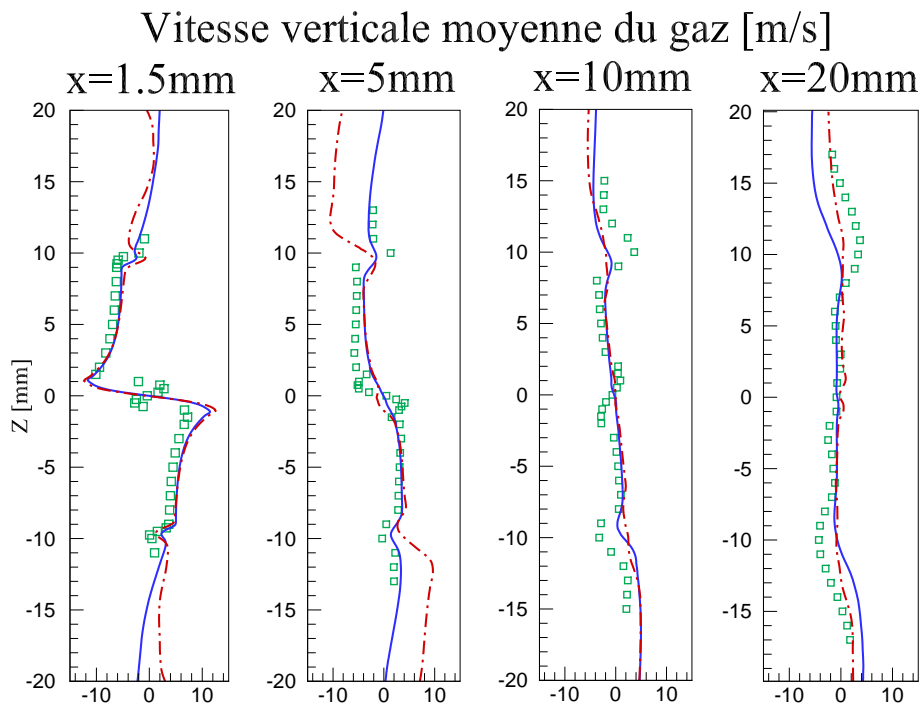
D'un point de vue expérimental, la fréquence du lâcher de tourbillons de Von-Karman présents dans le sillage de l'injecteur a été caractérisée en fonction de la vitesse du gaz V_g^{max} pour la configuration D₂₂ uniquement. Les résultats ont été obtenus en calculant une transformée de Fourier rapide (FFT) du signal de vitesse longitudinale mesuré par fil chaud en un point situé à $P = (4mm, 1mm)$ en aval du culot de l'injecteur.

À partir des résultats de simulation 2D, nous avons pu estimer la fréquence du lâcher tourbillonnaire en reproduisant le même protocole que celui utilisé expérimentalement. La FFT du signal de vitesse longitudinale relevé au point P est représentée sur la Figure 7.22. Le pic de fréquence observé correspond à la fréquence recherchée. Les fréquences obtenues expérimentalement et numériquement sont données dans le Tableau 7.8. Il apparaît que la simulation numérique a tendance à surestimer la fréquence expérimentale avec un écart relatif de l'ordre de 20%. À ce stade, nous ne connaissons pas les raisons exactes de ce désaccord. Nous pouvons toutefois émettre deux hypothèses sur les causes à l'origine de cet écart :

- ▷ La première hypothèse est que la nature turbulente de la couche limite sur la paroi de l'injecteur peut jouer un rôle non-négligeable sur le développement des tourbillons situés en aval. Ainsi, en ayant une description numérique inexacte de celle-ci (cf. §7.2.2.2), il semble difficile d'obtenir la bonne fréquence de détachement des tour-



(a) Vitesse longitudinale.



(b) Vitesse verticale.

FIGURE 7.18 – Profils de la vitesse moyenne du gaz en aval de l'injecteur pour la configuration C_9V_{50} . Légende : - - simulation avec maillage de référence (N_{10}) , — simulation avec maillage fin (N_{20}) , \square mesures expérimentales [27]

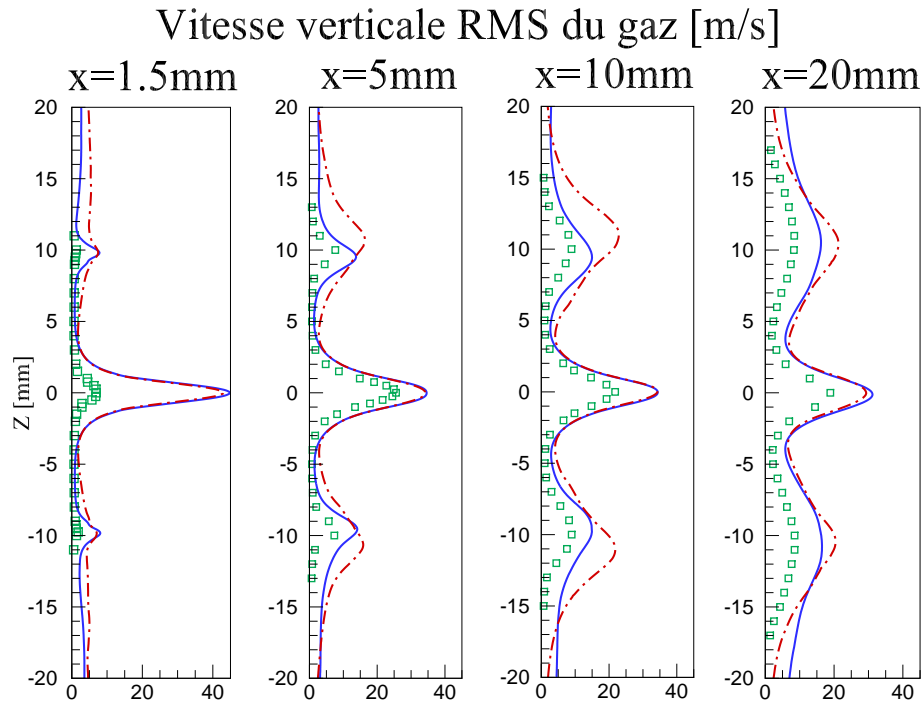
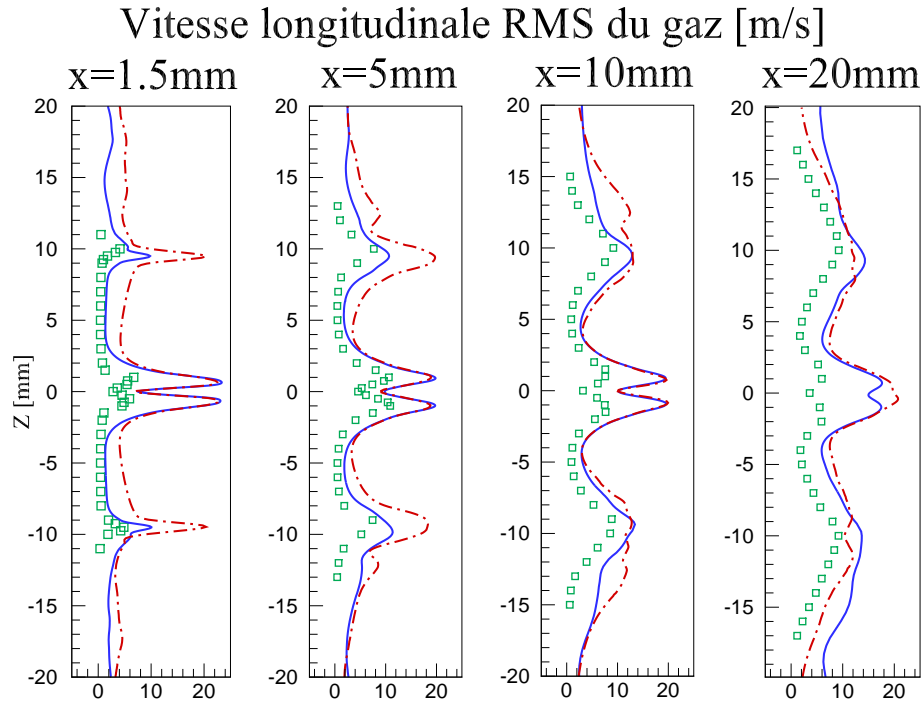
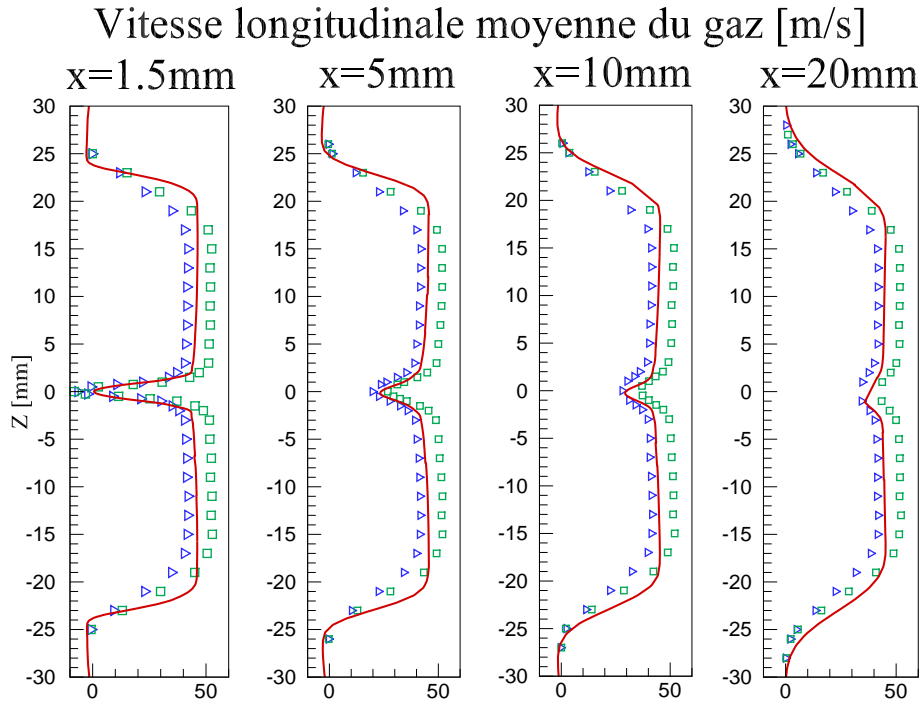
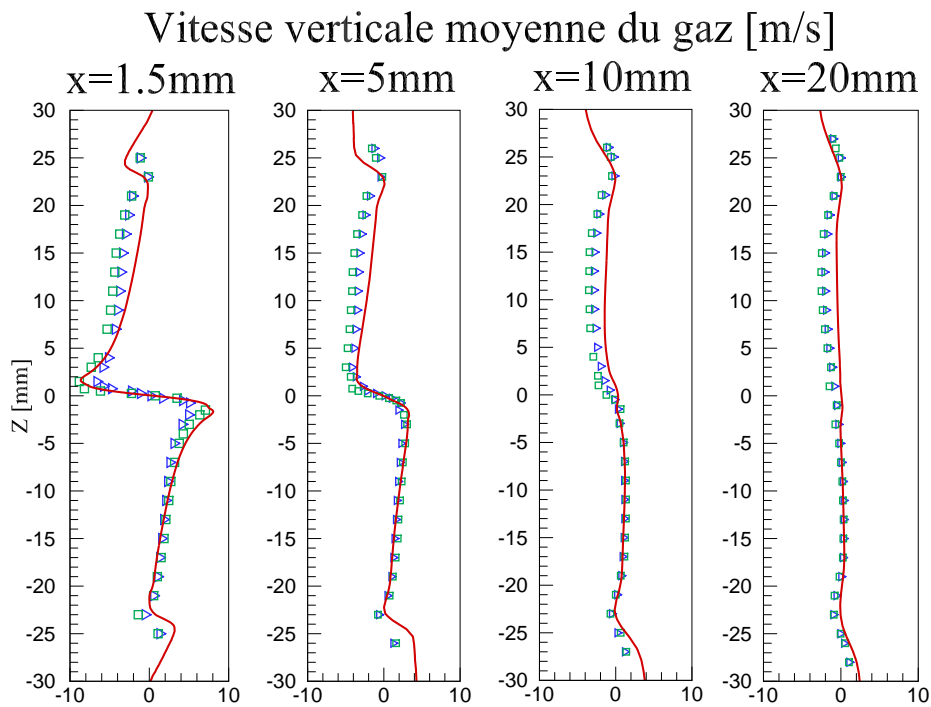


FIGURE 7.19 – Profils de la vitesse RMS du gaz en aval de l’injecteur pour la configuration C_9V_{50} . Légende : --- simulation avec maillage de référence (N_{10}) , — simulation avec maillage fin (N_{20}) , □ mesures expérimentales [27]

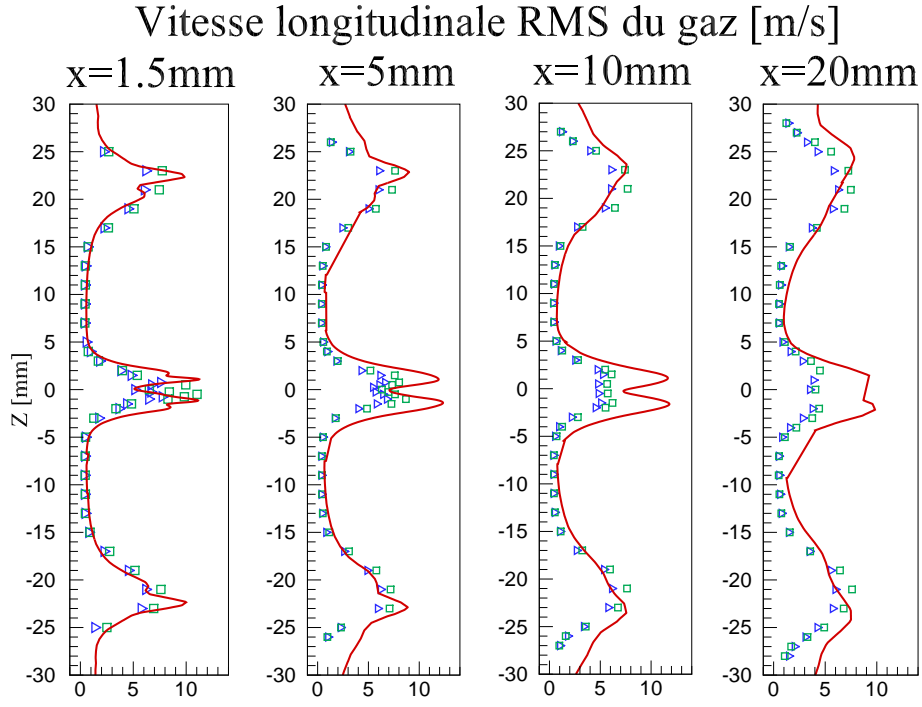


(a) Vitesse longitudinale.

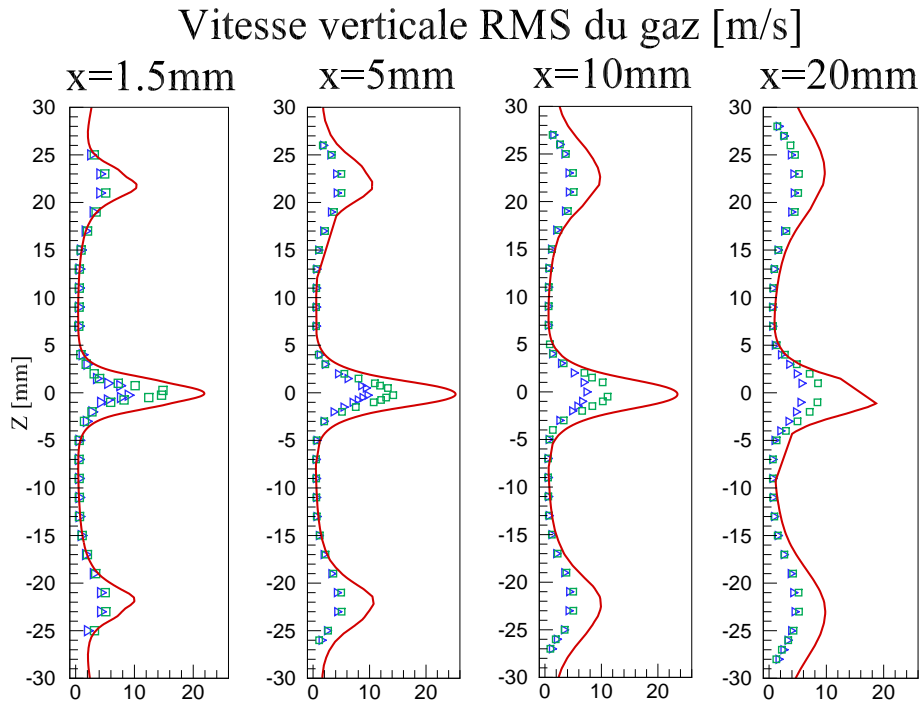


(b) Vitesse verticale.

FIGURE 7.20 – Profils de la vitesse moyenne du gaz en aval de l'injecteur pour la configuration $D_{22}V_{50}$. Légende : — simulation avec maillage de référence (N_{10}) , \blacktriangleright mesures expérimentales [27] pour $D_{22}V_{40}$, \blacksquare mesures expérimentales [27] pour $D_{22}V_{50}$.



(a) Vitesse longitudinale.



(b) Vitesse verticale.

FIGURE 7.21 – Profils de la vitesse RMS du gaz en aval de l’injecteur pour la configuration $D_{22}V_{50}$. Légende : — simulation avec maillage de référence (N_{10}) , \triangleright mesures expérimentales [27] pour $D_{22}V_{40}$, \square mesures expérimentales [27] pour $D_{22}V_{50}$.

billons. Cette hypothèse pourra être étudiée en effectuant la même étude dans la configuration C9, lorsque les résultats expérimentaux seront disponibles, afin de voir si les mêmes écarts sont présents dans le cas laminaire.

- ▷ La seconde hypothèse est que les structures tourbillonnaires ont un caractère tridimensionnel trop prononcé (sous l'effet d'instabilités transversales) pour que la simulation 2D puisse décrire correctement leur évolution.

	Expérience	Simulation 2D
Fréquence [Hz]	3590	4280 (± 45)
Écart relatif	—	19.2%

Tableau 7.8 – Résultats des fréquences des lâchers des tourbillons de Von-Karman obtenus pour la configuration D₂₂V₅₀N₁₀.

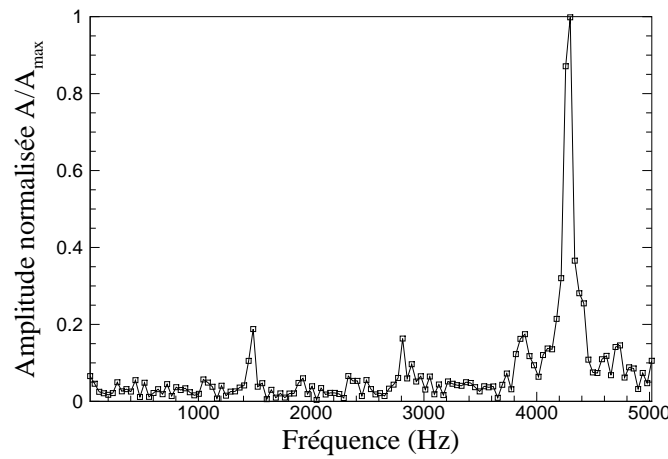


FIGURE 7.22 – FFT du signal de vitesse longitudinale mesuré dans le sillage de l'injecteur pour la configuration D₂₂V₅₀N₁₀ en monophasique.

L'étude de ces hypothèses nécessite des investigations plus approfondies qui sortent du cadre de cette thèse. De plus, dans l'étude expérimentale de référence [27], l'auteur a montré que, dans le cas diphasique, le détachement tourbillonnaire a peu d'influence sur le comportement global de la nappe liquide : la différence de gamme de fréquences entre celles du détachement tourbillonnaire de celles caractérisant l'oscillation de la nappe liquide atteste d'un faible couplage entre les deux phénomènes (cf. Figure 7.23). Pour cette raison, nous avons considéré que les écarts sur les fréquences de détachement tourbillonnaire ne représentaient pas une source d'erreur trop importante pour les étudier en diphasique.

7.2.2.4 Synthèse

Des simulations numériques 2D monophasiques ont été réalisées pour les configurations C₉V₅₀ et D₂₂V₅₀. Les comparaisons entre les résultats numériques et les mesures expérimentales ont montrés que les simulations permettent de capturer les principales caractéristiques de l'écoulement d'air dans la veine et en aval de l'injecteur. Toutefois, l'approche 2D présente certaine limitation notamment en ce qui concerne la description des fluctuations des champs de vitesse. Ces limitations devront être prises en compte lors de l'interprétation des résultats des simulations diphasiques présentées dans la sous-section suivante.

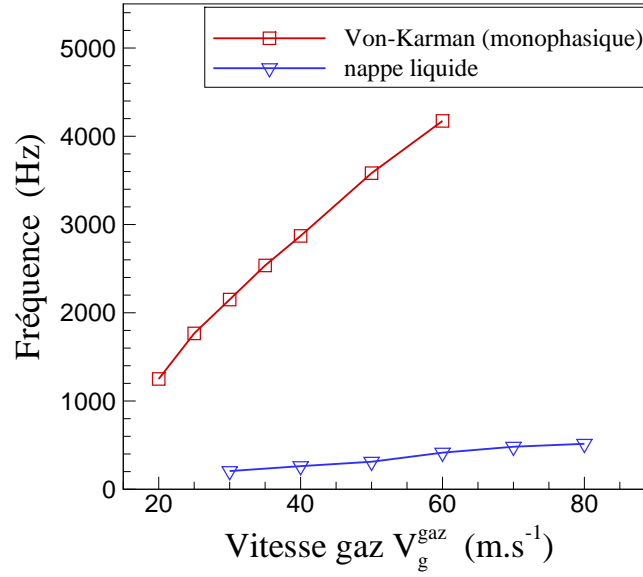


FIGURE 7.23 – Comparaison de la fréquence de détachement des tourbillons de Von-Karman (cas monophasique) et de la fréquence de battement de la nappe liquide. Résultats des mesures expérimentales de Déjean [27] pour la configuration D₂₂.

7.2.3 Résultats des simulations 2D diphasiques du cœur liquide (sans couplage avec le modèle d'atomisation)

On rappelle que le principal objectif des simulations 2D diphasiques du cœur liquide est d'évaluer la capacité du modèle bifluide à décrire l'évolution du comportement *aux grandes échelles* du cœur liquide de la nappe, en fonction des configurations géométriques et des conditions d'injection du gaz. Comme indiqué dans la matrice des cas tests [Tableau 7.6](#), des simulations 2D ont été réalisées avec les maillages de référence N₁₀ pour trois vitesses d'injection d'air V₃₀, V₅₀, V₈₀ dans les configurations C₉ et D₂₂. Une simulation a également été effectuée avec le maillage fin N₂₀ pour la configuration C₉V₅₀ afin d'étudier l'influence de la résolution du maillage.

7.2.3.1 Champs instantannés

Observations qualitatives

La [Figure 7.24](#) montre des vues instantanées des résultats de simulation de l'écoulement diphasique en sortie de l'injecteur pour les différentes vitesses d'air étudiées dans la configuration convergente C₉. La [Figure 7.25](#) présente les mêmes résultats pour la configuration divergente C₂₂. Qualitativement, on observe que plus la vitesse d'air augmente, plus la longueur de rupture du cœur liquide diminue. Ceci est en accord avec les résultats expérimentaux.

La représentation du champ de vortacité de l'écoulement d'air autour de la nappe liquide permet de visualiser, pour chaque cas, la complexité des interactions entre le liquide et le gaz. Pour la configuration C₉V₅₀, on remarque que le cœur liquide semble confiné entre les deux couches de vortacité issues du décollement des deux couches limites laminares à partir des bords de fuite de l'injecteur. Ce confinement semble d'autant plus important que la vitesse d'air augmente. Pour les cas D₂₂, ce phénomène n'est pas observé.

Les observations précédentes, sur l'effet de confinement dans le cas convergent, sont corroborées par la [Figure 7.26](#) où est représentée l'évolution temporelle du cœur liquide à différents

instants successifs pour les configurations C_9 et D_{22} . Sur cette figure, on peut également observer le détachement de structures liquides issues de la fragmentation primaire.

Influence du maillage

Pour évaluer l'effet d'une résolution plus importante sur la description du cœur liquide par le modèle bifluide, on visualise sur la [Figure 7.27](#) les champs de fraction volumique du liquide obtenus avec le maillage de référence N_{10} et le maillage fin N_{20} pour la configuration C_9V_{50} . Qualitativement, on n'observe pas de différences majeures entre les deux résultats (hormis celles liées à un décalage temporel entre les deux visualisations). Grâce à l'utilisation du limiteur compressif (présenté au paragraphe [§2.2.8.2](#)) permettant de limiter la diffusion numérique de l'interface et de préserver le cœur liquide, la résolution du maillage de référence N_{10} (avec $e_l/\Delta x = 10$) paraît suffisante pour décrire les grandes échelles du cœur liquide. En ce qui concerne les petites structures liquides formées suite à la rupture partielle du cœur liquide, on remarque que le maillage fin permet de mieux capturer leurs interfaces. Toutefois, dans le cadre de notre méthodologie de couplage multi-échelle qui prévoit de transférer les petites structures liquides sous-résolues à un modèle de spray (cf. chapitre [§6](#)), l'étalement artificiel de l'interface de ces structures observé avec le maillage de référence n'est pas problématique.

7.2.3.2 Longueur de rupture moyenne du cœur liquide

L'étude expérimentale de Déjean [\[27\]](#) a mis en évidence l'influence de la vitesse d'air sur la longueur de rupture moyenne du cœur liquide : plus la vitesse d'air augmente, plus la longueur de rupture moyenne du cœur liquide L_b diminue. Pour savoir si le même comportement peut être reproduit numériquement, nous avons calculé la longueur L_b pour chaque simulation numérique effectuée ⁴.

La [Figure 7.32a](#) montre la superposition des résultats numériques et expérimentaux pour la configuration C_9 . On observe globalement que la simulation numérique a tendance à sous-estimer la longueur L_b , même si les valeurs obtenues numériquement sont d'autant plus proches des valeurs expérimentales que la vitesse d'injection du gaz est grande. Pour le cas $C_9V_{50}N_{20}$, on constate que la longueur L_b obtenue avec le maillage fin est quasiment identique à celle donnée par le maillage de référence. La résolution du maillage de référence N_{10} semble alors suffisante pour décrire les grandes échelles du cœur liquide.

Pour la configuration D_{22} , les résultats sont présentés sur la [Figure 7.33a](#). Dans ce cas, on observe le même comportement que celui décrit précédemment dans la configuration C_9 , à savoir, une sous-estimation globale de la longueur de rupture moyenne du cœur liquide par la simulation et une augmentation de l'écart entre les résultats expérimentaux et numériques pour les régimes où la vitesse d'injection de l'écoulement d'air est faible.

Discussions

Les résultats montrent que plus la vitesse d'injection du gaz augmente, plus la longueur de rupture du cœur liquide diminue. Ainsi, les simulations numériques 2D permettent bien de reproduire qualitativement le comportement observé expérimentalement.

Cependant, on observe pour les deux configurations géométriques que l'erreur sur la prévision de la longueur de rupture moyenne du cœur liquide augmente pour de faibles vitesses d'air, c'est-à-dire lorsque la valeur de la longueur L_b obtenue expérimentalement est grande.

4. En pratique, le calcul de la longueur de rupture L_b a été effectué en considérant que l'interface du cœur liquide est représentée par l'isocontour $\alpha_l = 0.5$. L'extraction et la mesure de la longueur du cœur liquide ont ensuite été réalisées en utilisant les outils utilisés pour le post-traitement des données expérimentales [\[27\]](#).

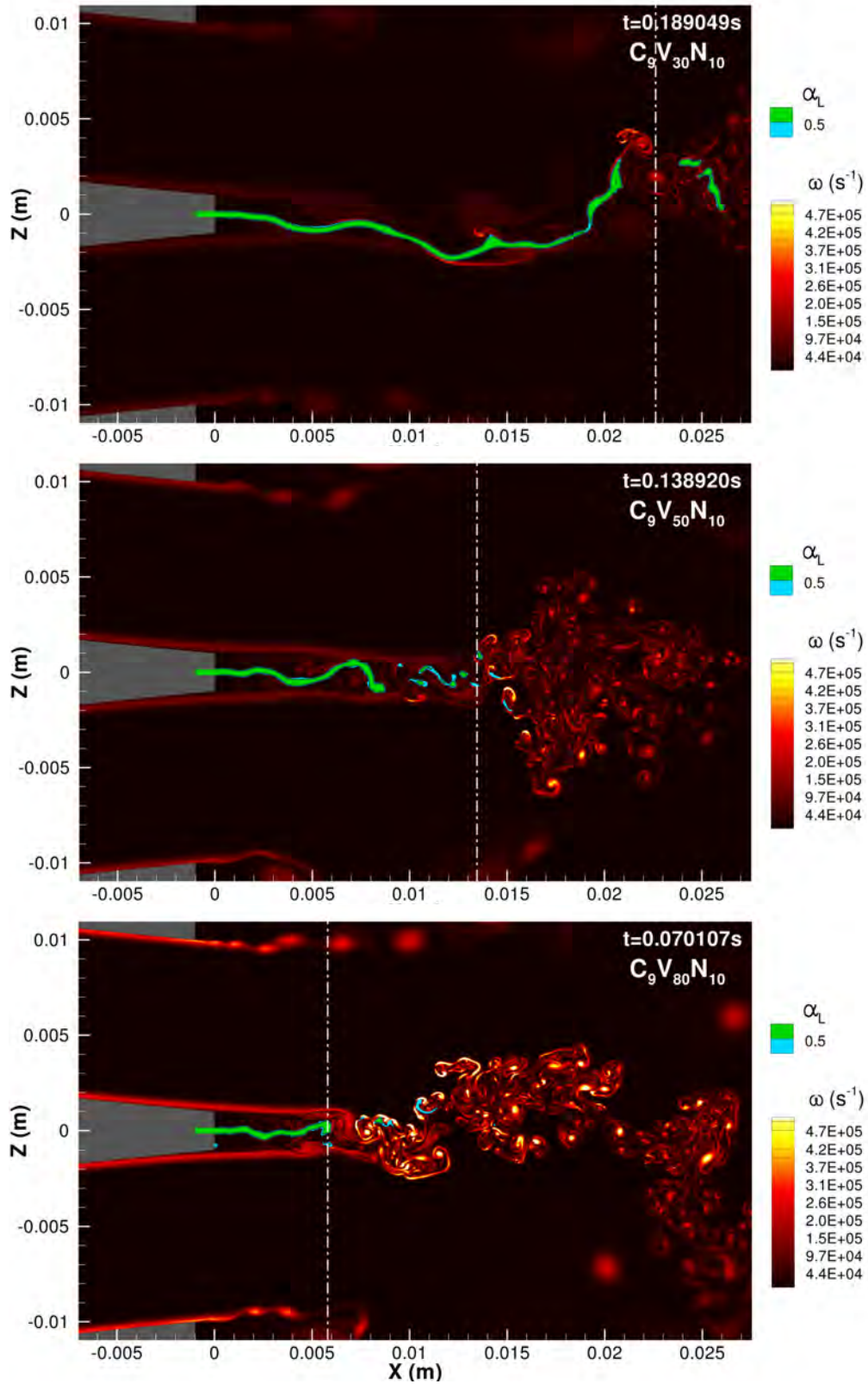


FIGURE 7.24 – Champs instantanés de l'écoulement diphasique en sortie d'injecteur obtenus par les simulations 2D des configurations $C_9V_{30}N_{10}$, $C_9V_{50}N_{10}$ et $C_9V_{80}N_{10}$ avec le modèle bifluide. Légende : champ de la norme de la vorticité dans la phase gaz $|\omega|$ superposé au champ de fraction volumique liquide α_L . Trait blanc vertical : distance de rupture moyenne du cœur liquide mesurée expérimentalement.

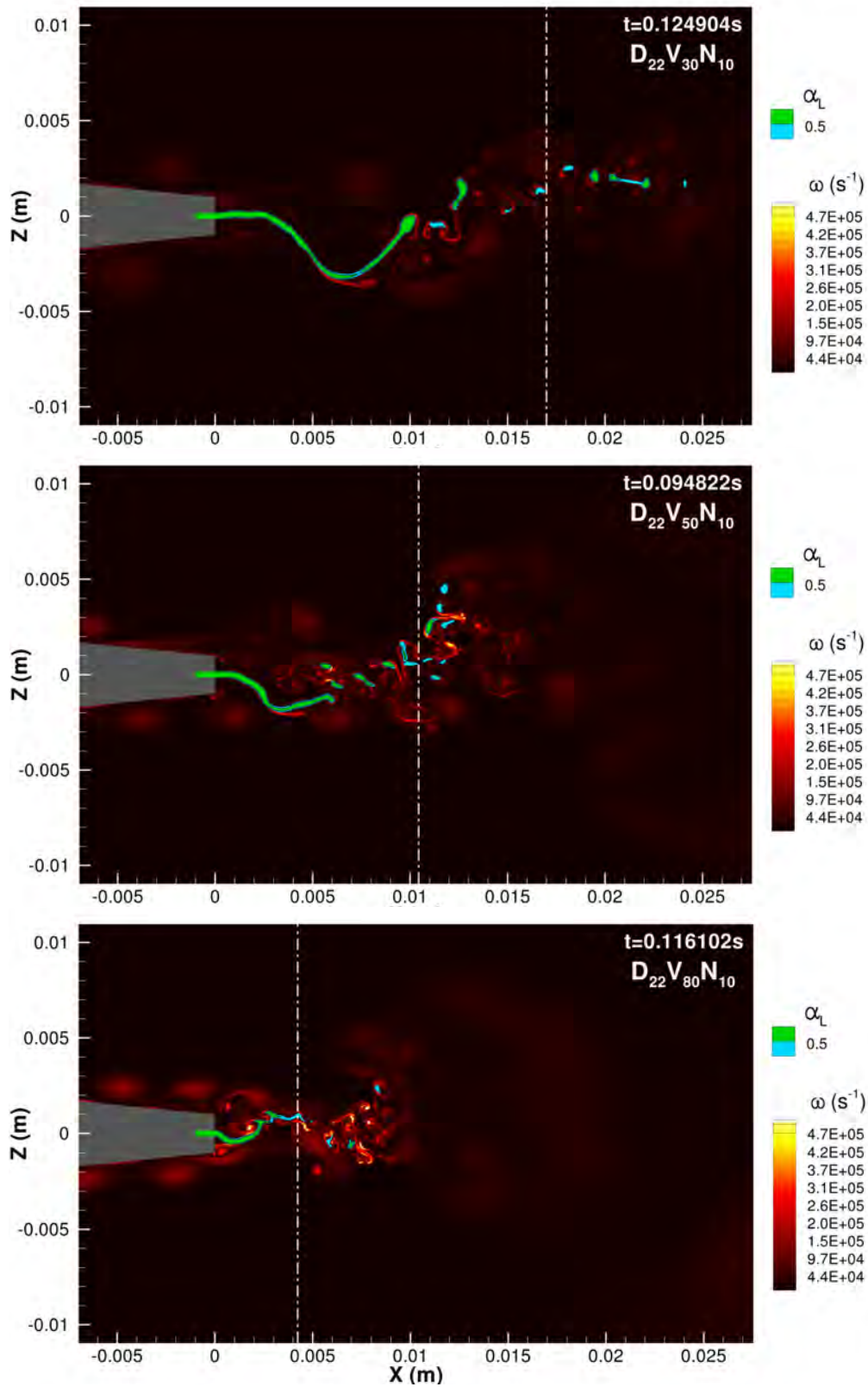
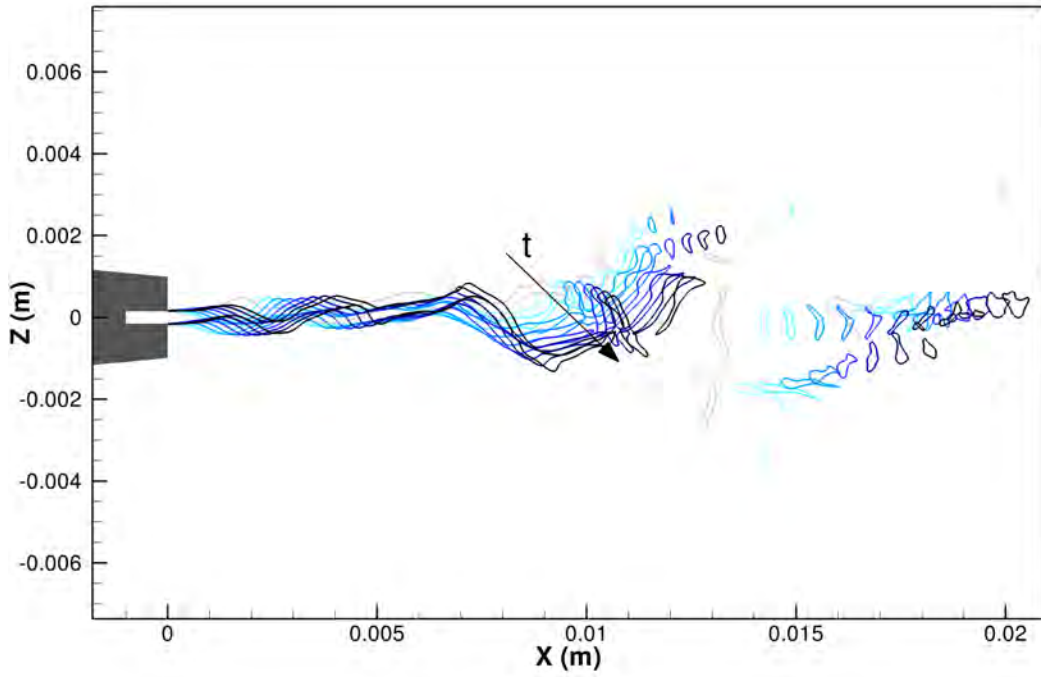
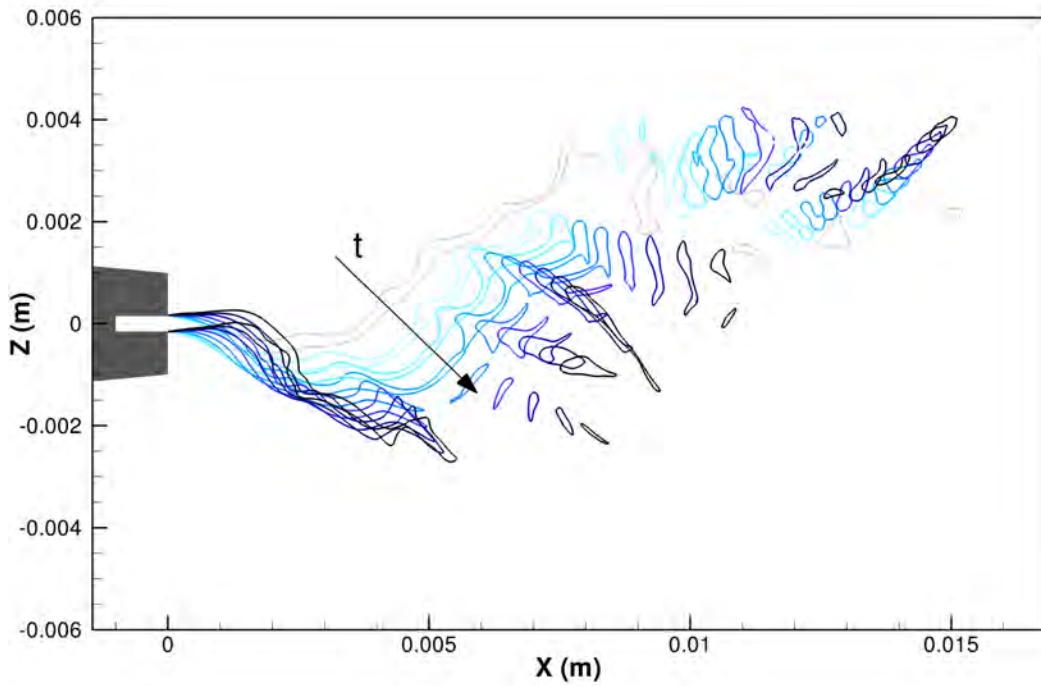


FIGURE 7.25 – Champs instantanés de l'écoulement diphasique en sortie d'injecteur obtenus par les simulations 2D des configurations $D_{22}V_{30}N_{10}$, $D_{22}V_{50}N_{10}$ et $D_{22}V_{80}N_{10}$ avec le modèle bifluide. Légende : champ de la norme de la vorticité dans la phase gaz $|\omega|$ superposé au champ de fraction volumique liquide α_L . Trait blanc vertical : distance de rupture moyenne du cœur liquide mesurée expérimentalement.

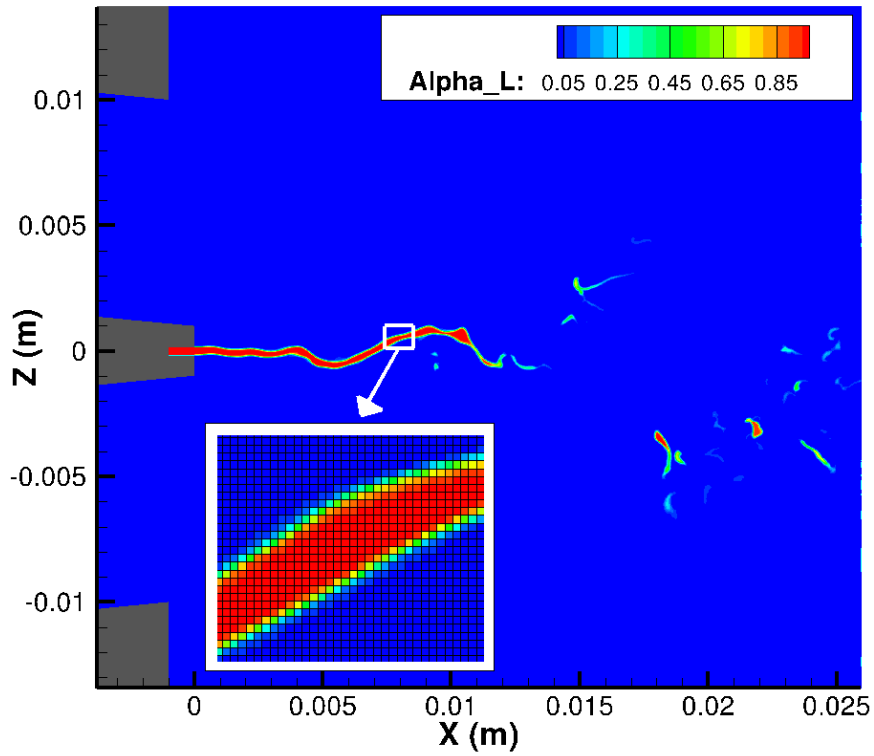


(a) Configuration $C_9V_{50}N_{10}$

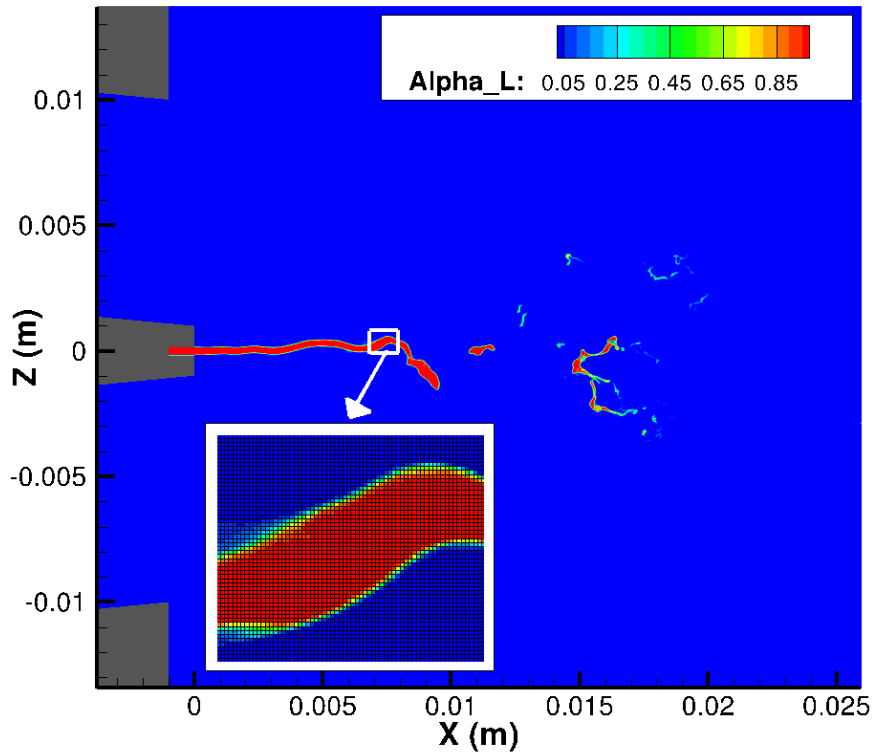


(b) Configuration $D_{22}V_{50}N_{10}$

FIGURE 7.26 – Évolution temporelle du cœur liquide. Légende : isocontour $\alpha_l = 0.5$ à différents instants avec un intervalle de temps $\Delta t = 0.1ms$.



(a) Maillage de référence N_{10} .



(b) Maillage fin N_{20} .

FIGURE 7.27 – Influence du maillage sur la résolution du coeur liquide avec le modèle bifluide. Champs instantannés de fraction volumique du liquide visualisés à des instants différents.

Grâce à l'étude effectuée précédemment dans le cas 2D monophasique, nous avons constaté que plus on s'éloigne dans le sillage de l'injecteur, plus les fluctuations de vitesse sont sur-estimées⁵. On peut alors supposer que, pour les faibles vitesses d'air, la rupture prématurée du cœur liquide est causée par une sur-estimation de plus en plus importante des vitesses RMS "vues" par le cœur liquide lorsque celui-ci évolue de plus en plus en aval de l'injecteur.

7.2.3.3 Fréquence d'oscillation globale du cœur liquide

En ce qui concerne la fréquence d'oscillation globale de la nappe liquide f_{nappe} , l'étude expérimentale de Déjean [27] a mis en évidence que l'augmentation de la vitesse d'injection de l'écoulement d'air conduit à une augmentation de la fréquence d'oscillation globale du cœur liquide.

Pour déterminer la fréquence d'oscillation globale f_{nappe} , nous avons suivi la procédure utilisée pour traiter les données expérimentales. Celle-ci consiste à extraire le signal temporel correspondant au déplacement vertical du cœur liquide pour une abscisse donnée, et à calculer la transformée de Fourier de ce signal afin d'obtenir la fréquence d'amplitude maximale. En répétant ce calcul pour plusieurs plans de mesure en aval de l'injecteur, on peut alors obtenir l'évolution de la fréquence d'oscillation d'amplitude maximale en fonction de la distance à l'injecteur (c'est-à-dire $f_{nappe}(x)$).

Les résultats des calculs sont présentés sur la Figure 7.31 pour la configuration C₉ et sur la Figure 7.29 pour la configuration D₂₂ en traçant l'évolution du spectre (adimensionné) du signal d'oscillation en fonction de la distance à l'injecteur. Dans la plupart des cas, on observe une crête qui traduit la présence d'une même fréquence f_{nappe} qui est prédominante sur toute la longueur du cœur liquide. Cette observation est conforme aux résultats expérimentaux.

Les fréquences d'oscillations globales f_{nappe} obtenues numériquement sont comparées aux valeurs expérimentales sur la Figure 7.32b et la Figure 7.33b pour chacune des configurations géométriques. On constate que l'influence de la vitesse du gaz sur la fréquence f_{nappe} est bien reproduite qualitativement. D'un point de vue quantitatif, on remarque toutefois que les fréquences obtenues par la simulation ont tendance à être surestimées par rapport aux valeurs réelles.

Pour évaluer l'influence de la résolution du maillage, le résultat obtenu pour le cas C₉V₅₀N₂₀ est donné sur la Figure 7.32b. On observe un léger écart entre les résultats obtenus avec le maillage N₁₀ et N₂₀ mais, à ce stade, il est difficile de conclure sur une réelle influence du maillage compte-tenu du fait que :

- ▷ la résolution fréquentielle n'est pas très importante pour le maillage fin (à cause des coûts de calcul), donc l'erreur sur $f_{nappe}^{N_{20}}$ peut être potentiellement grande (cf. barre d'erreur sur la Figure 7.32b)
- ▷ la fréquence de $f_{nappe} = 510Hz$ trouvée pour le maillage fin est aussi très présente dans le spectre obtenu avec le maillage de référence, dans la zone proche de l'injecteur (cf. Figure 7.30b).

7.2.3.4 Synthèse

Des simulations numériques 2D du cœur liquide d'une nappe cisillée ont été réalisées avec le modèle bifluide pour les configurations C₉V₅₀ et D₂₂V₅₀. Les comparaisons entre les résultats numériques et les mesures expérimentales ont montré que ce modèle permet bien de reproduire le comportement qualitatif du cœur liquide en fonction des conditions d'injection de l'écoulement d'air et de la géométrie. D'un point de vue quantitatif, les résultats

5. En faisant abstraction des valeurs un peu particulières du plan de mesure le plus proche de l'injecteur dans le cas C₉

numériques ont tendance à sous-estimer la longueur de rupture moyenne du cœur liquide et à surestimer la fréquence d'oscillation globale de celui-ci. Compte-tenu des observations déjà faites lors de l'étude monophasique, ces écarts sont vraisemblablement dus aux limitations d'une approche 2D.

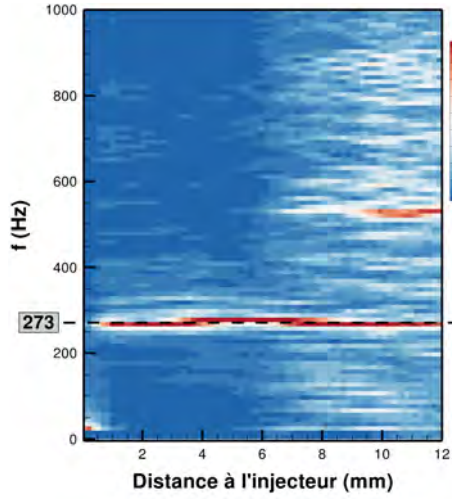
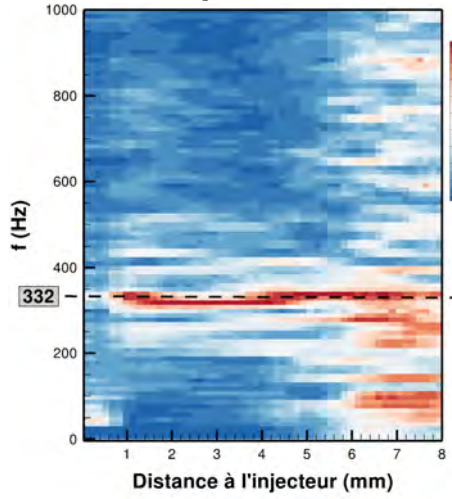
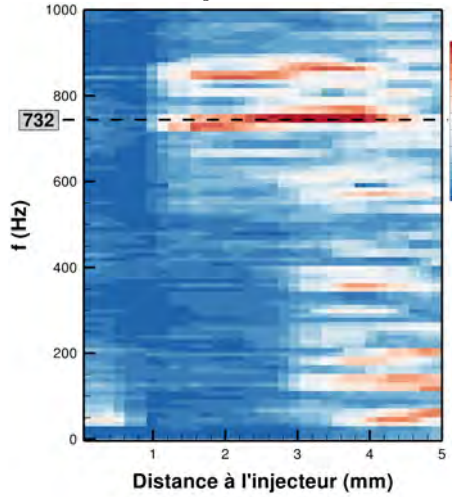

 (a) $V_g^{max} = 30\text{m/s}$

 (b) $V_g^{max} = 50\text{m/s}$

 (c) $V_g^{max} = 80\text{m/s}$

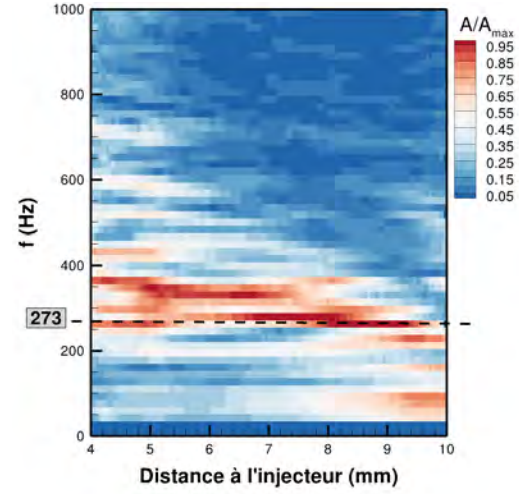
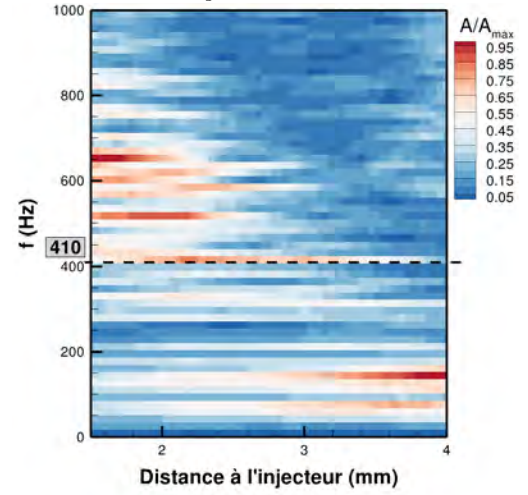
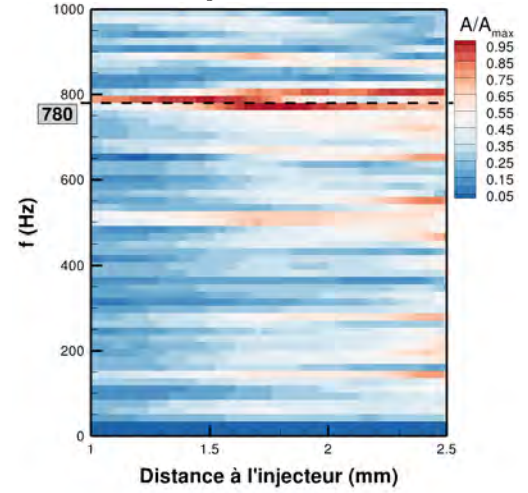
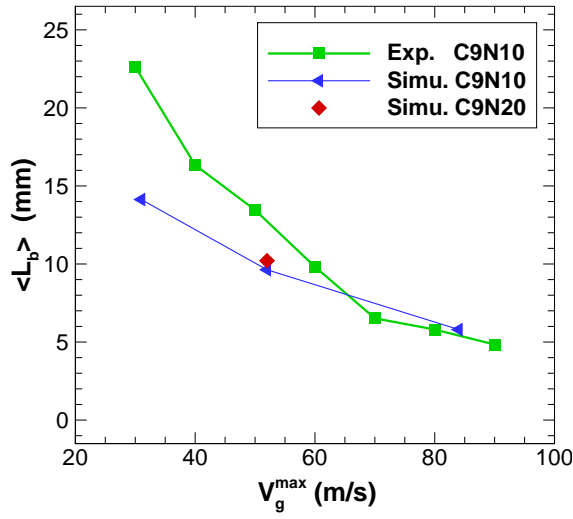
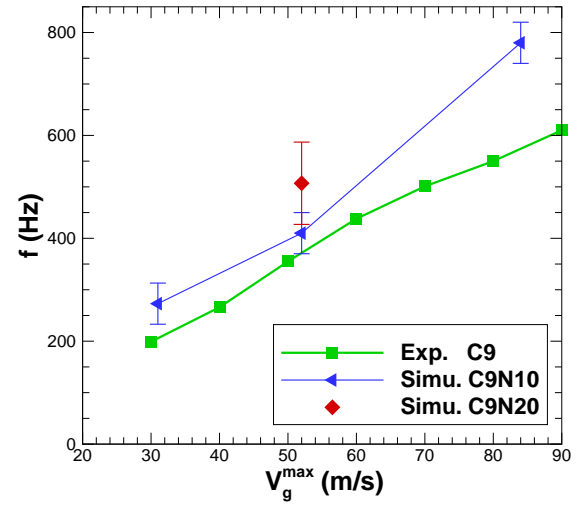
 FIGURE 7.29 – Évolution de la fréquence d'oscillation du coeur liquide en fonction de la distance à l'injecteur, pour la géométrie D_{22} .

 (a) $V_g^{max} = 30\text{m/s}$

 (b) $V_g^{max} = 50\text{m/s}$

 (c) $V_g^{max} = 80\text{m/s}$

 FIGURE 7.31 – Évolution de la fréquence d'oscillation du coeur liquide en fonction de la distance à l'injecteur, pour la géométrie C_9 .

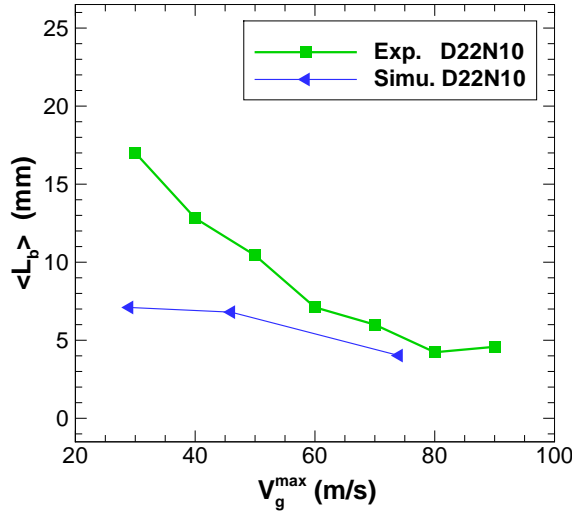


(a) Longueur de rupture moyenne du coeur liquide.

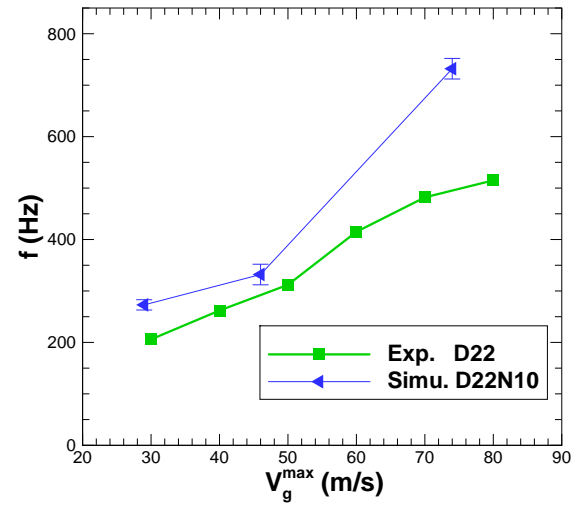


(b) Fréquence d'oscillation globale de la nappe liquide.

FIGURE 7.32 – Influence de la vitesse de l'écoulement d'air V_g^{max} pour la configuration C₉. Comparaisons des résultats expérimentaux (exp.) et numériques 2D (simu.).



(a) Longueur de rupture moyenne du coeur liquide.



(b) Fréquence d'oscillation globale de la nappe liquide.

FIGURE 7.33 – Influence de la vitesse de l'écoulement d'air V_g^{max} pour la configuration D₂₂. Comparaisons des résultats expérimentaux (exp.) et numériques 2D (simu.).

7.2.4 Résultats des simulations 2D avec la méthodologie de couplage

Cette sous-partie présente les résultats des simulations 2D effectuées pour le cas divergent D₂₂ en utilisant la méthodologie de couplage décrite au chapitre §6. Ces résultats sont essentiellement qualitatifs du fait de certaines limitations actuelles du modèle d'atomisation.

En effet, étant donné que le modèle d'atomisation n'est pas capable de prévoir localement la distribution en taille des gouttes issues de la fragmentation du cœur liquide (cf. §6.4.1.2), celle-ci a été prescrite. Pour chaque configuration, le diamètre d_p des gouttes injectées a été pris comme étant égal au diamètre de Sauter moyen obtenu expérimentalement lors de la caractérisation du spray final. Les valeurs utilisées pour les simulations sont données dans le Tableau 7.9.

	V ₃₀	V ₅₀	V ₈₀
d_p [μm]	400	213	113

Tableau 7.9 – Diamètres des gouttes imposés lors des simulations 2D multi-échelles de la configuration D₂₂ avec différentes vitesses d'air.

7.2.4.1 Visualisations globales des résultats des simulations avec couplage

Sur la Figure 7.34, nous avons représenté les résultats de simulation obtenus (à plusieurs instants successifs) pour l'une des configurations étudiées.

Proche de l'injecteur, on observe la présence du cœur liquide résolu par le modèle bifluide. Comme nous l'avons constaté précédemment, ce modèle permet de capturer la croissance des instabilités longitudinales conduisant au battement et à la fragmentation du cœur liquide, sous l'effet du cisaillement par l'écoulement gazeux. Plus en aval, les amas liquides détachés du cœur sont eux-mêmes sujets à de très fortes déformations et à la fragmentation (cf. les structures identifiées par les flèches blanches et noires sur la Figure 7.34). Pour un maillage donné, la diminution des tailles caractéristiques de ces structures mène progressivement à une sous-résolution de celles-ci : l'interface gaz/liquide est peu à peu diffusée de manière artificielle.

Dans les zones identifiées comme sous-résolues par le modèle d'atomisation (cf. critère d'activation §6.4.1.1), celui-ci autorise localement le transfert de la phase liquide (masse + quantité de mouvement) du modèle bifluide vers le modèle de spray. Le liquide ainsi transféré est ré-injecté sous forme de particules numériques. Il est important de noter que l'expression du critère d'activation du modèle d'atomisation assure bien l'intégrité du cœur liquide résolu par le modèle bifluide puisqu'on n'observe pas de production de gouttes au niveau de celui-ci.

Ces résultats de simulation mettent également en avant l'un des intérêts majeurs de la méthodologie de couplage : le taux de production est piloté spatialement et temporellement par le régime de fragmentation du cœur liquide. Ainsi, contrairement à une approche où l'injection du spray est réalisée de manière statistique, le couplage permet de reproduire (au moins qualitativement) les lâchers périodiques de paquets de gouttes dus au battement de la nappe liquide.

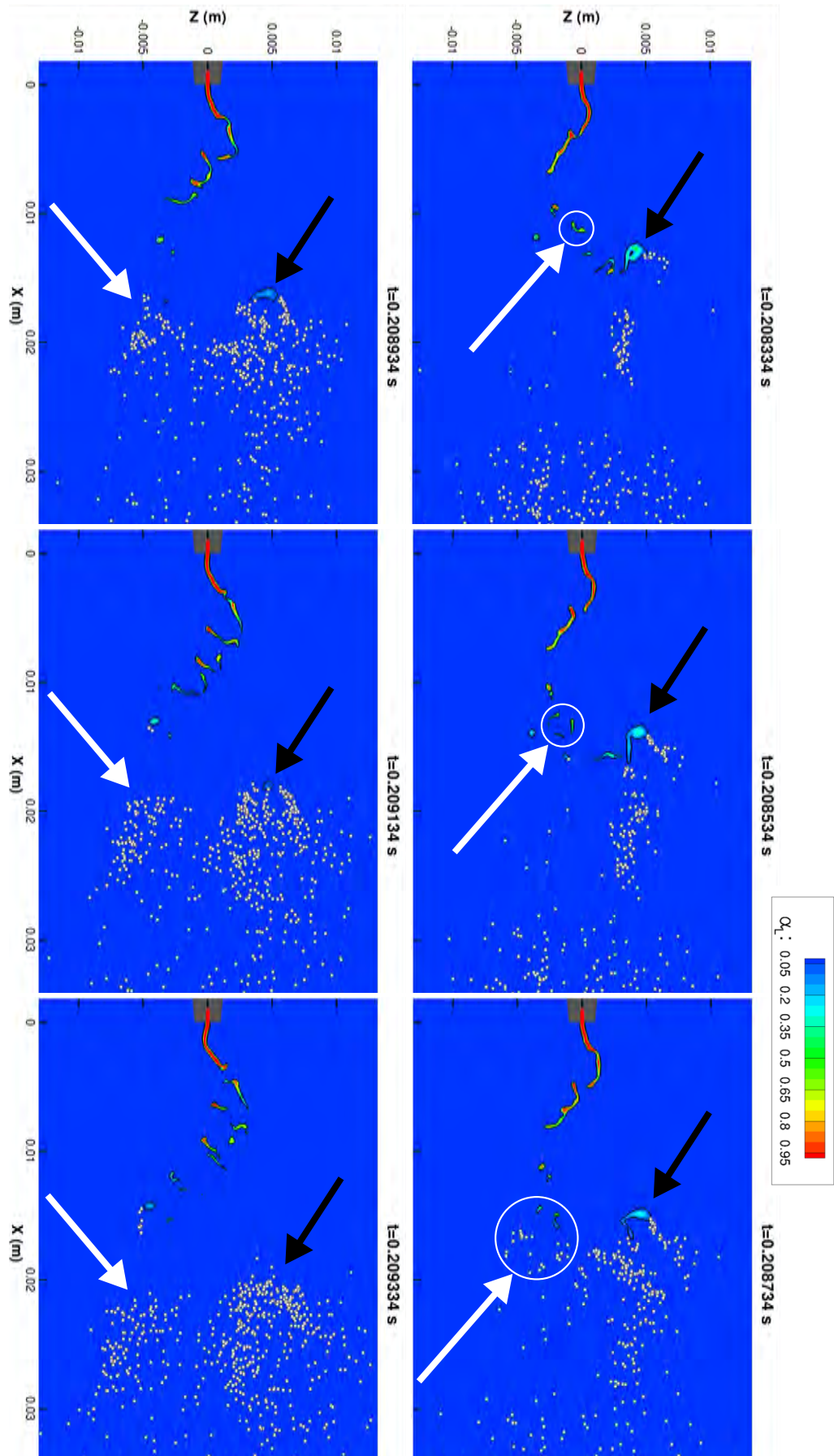


FIGURE 7.34 – Visualisation du couplage entre le modèle biffuide et le modèle de spray grâce au modèle d'atomisation. Légende : champ de fraction volumique liquide dans le modèle biffuide α_l , particules numériques représentées par des points blancs

7.2.4.2 Développement du spray en aval de l'injecteur

La Figure 7.35 montre des vues instantanées des sprays obtenus pour les trois vitesses d'injection d'air considérées. On observe que l'angle d'ouverture du spray diminue pour des vitesses de l'écoulement d'air importantes. Ce comportement semble cohérent avec le fait qu'une augmentation de la vitesse d'air a tendance à entraîner plus rapidement les gouttes vers l'aval. Le calcul des moyennes temporelles des champs de fraction volumique occupée par les gouttes a permis de confirmer cette observation (cf. Figure 7.36).

D'un point de vue expérimental, le même comportement a été observé qualitativement. Cependant, l'évolution de l'angle de spray (ou des mesures du flux volumique de gouttes à différentes sections) en fonction de la vitesse d'injection de l'air n'a pas été étudiée en détail. À ce stade, il n'est donc pas possible d'évaluer de manière plus quantitative les résultats numériques obtenus. On rappelle toutefois que le fait d'avoir imposé la distribution en taille des gouttes créées par le modèle d'atomisation rend les conclusions de telles comparaisons somme toute relatives.

7.2.4.3 Synthèse

Les simulations 2D réalisées avec la méthodologie de couplage ont permis de valider la mise en place et le bon fonctionnement de celle-ci au sein du code SLOSH. À l'heure actuelle, les résultats sont essentiellement qualitatifs compte-tenu du fait que la distribution en taille des gouttes doit être imposée. Toutefois, ces résultats sont très prometteurs car nous avons pu observer que cette approche permet de prendre en compte l'aspect intermittent de la production des gouttes (lié au battement de la nappe) et l'influence de la vitesse de l'écoulement d'air sur l'ouverture du spray.

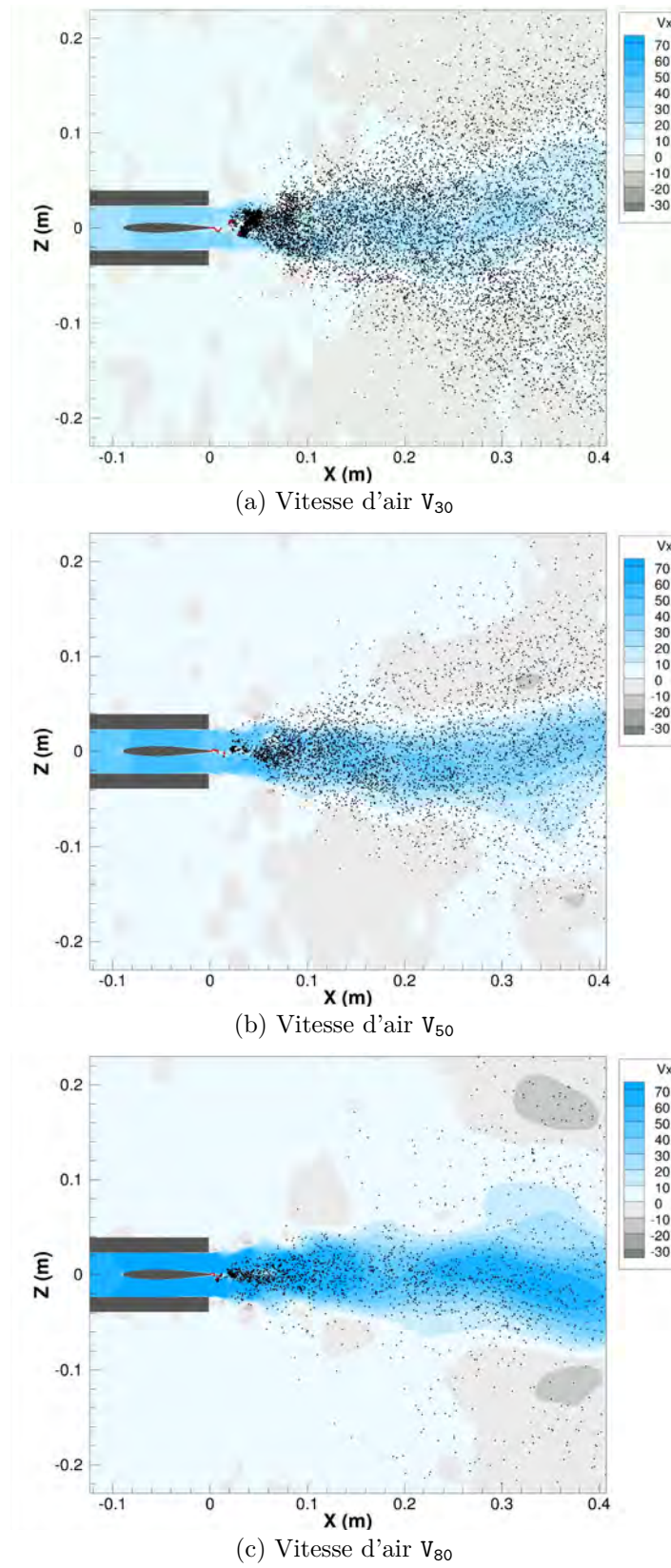


FIGURE 7.35 – Vues instantanées des sprays obtenus par simulations 2D multi-échelles, pour différentes vitesses d'air dans la configuration D_{22} . Légende : vitesse longitudinale de l'air V_x , cœur liquide en rouge, spray (particules numériques) en noir.

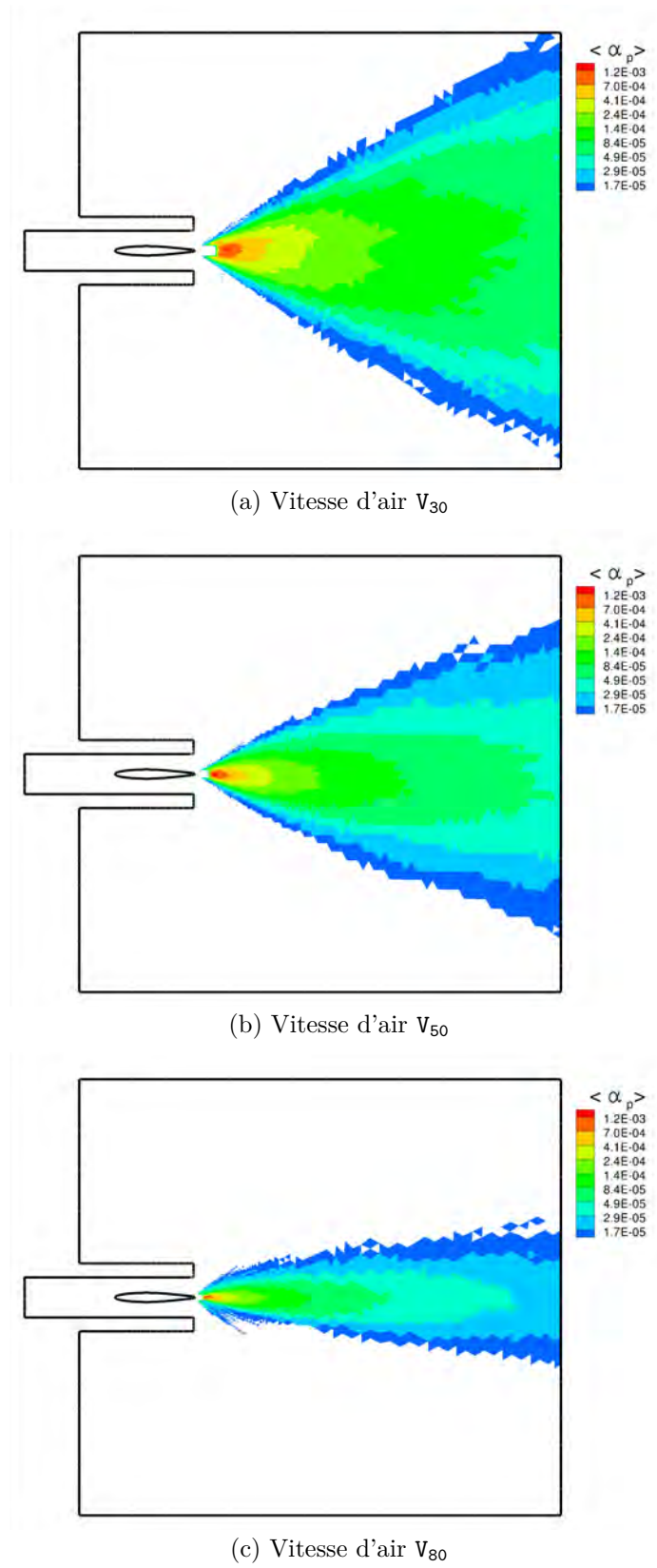


FIGURE 7.36 – Champs moyens de la fraction volumique du spray $\langle \alpha_p \rangle$ obtenus par simulations 2D multi-échelles, pour différentes vitesses d'air dans la configuration D₂₂ (seuillage pour $\langle \alpha_p \rangle$ inférieure à 10E-5).

7.3 Simulations 3D de la nappe liquide plane cisailée

Les simulations 2D présentées précédemment ont mis en évidence certaines limitations concernant la description du comportement du cœur liquide (par exemple, la surestimation de sa fréquence d'oscillation globale et la sous-estimation de sa longueur de rupture moyenne). Nous avons alors émis l'hypothèse que ces dernières étaient liées au caractère bidimensionnel des simulations. Afin de vérifier le bien fondé d'une telle hypothèse, des simulations 3D ont été réalisées.

Dans ce contexte, l'objectif des simulations tridimensionnelles a été d'évaluer la capacité du modèle bifluide à reproduire les mécanismes de déstabilisation du cœur liquide, avec notamment l'apparition d'instabilités transversales qui conduisent à la formation de ligaments. Les résultats obtenus ont été comparés aux données expérimentales et aux résultats des simulations 2D, afin de quantifier l'influence du 3D par rapport au 2D.

Compte-tenu du temps et des ressources de calcul limitées dont nous disposions dans le cadre de cette thèse, l'étude tridimensionnelle n'a été effectuée que pour la configuration convergente C_9V_{80} , en ne simulant qu'une certaine largeur de l'injecteur réel. Pour les mêmes raisons, l'étude du cas monophasique n'a pas été réalisée afin de disposer d'assez de ressources pour les cas diphasiques (sans et avec couplage).

7.3.1 Paramètres numériques

La configuration C_9V_{80} utilisée pour réaliser les simulations 3D (cf. Figure 7.37) est obtenue en effectuant une extrusion du domaine 2D présenté au paragraphe §7.2.1.1. La largeur d'extrusion est de :

$$L_y = 20e_l = 6mm$$

Concernant les conditions aux limites, nous avons imposé une condition de symétrie sur les parois de la troisième dimension⁶. Les autres conditions sont identiques au cas 2D. Les profils 3D d'entrée du gaz et du liquide sont imposés en considérant que les profils des cas 2D sont invariants selon la direction transversale.

Afin de réduire les coûts de la simulation, la zone résolue en aval de l'injecteur a été fortement réduite par rapport au cas 2D⁷. Les paramètres du maillage sont donnés dans le Tableau 7.10, en reprenant les notations déjà définies au paragraphe §7.2.1.2. On précise également que la résolution transversale (selon Y) est égale à Δx_{inj} .

Le temps total t_{total} , donné dans le Tableau 7.10, correspond au temps physique final atteint par la simulation après avoir effectué successivement l'étude numérique avec et sans le couplage multi-échelle. Le nombre d'heures CPU utilisées pour l'ensemble de cette étude 3D y est également indiqué.

7.3.2 Résultats des simulations 3D diphasiques du cœur liquide (sans couplage avec le modèle d'atomisation)

7.3.2.1 Visualisation globale du cœur liquide

La Figure 7.38 présente l'évolution du cœur liquide résolu par le modèle bifluide à différents instants successifs. Cette série d'images permet d'observer clairement le mouvement

6. Ce choix a été privilégié par rapport à l'utilisation d'une condition de type périodique afin de réduire les possibilités d'avoir une excitation artificielle d'un mode transversal

7. Pour la configuration C_9 en 2D, on rappelle que la zone résolue en aval de l'injecteur a été dimensionnée à partir du cas le plus défavorable en terme de nombre de cellules (cf. §7.2.1.2).

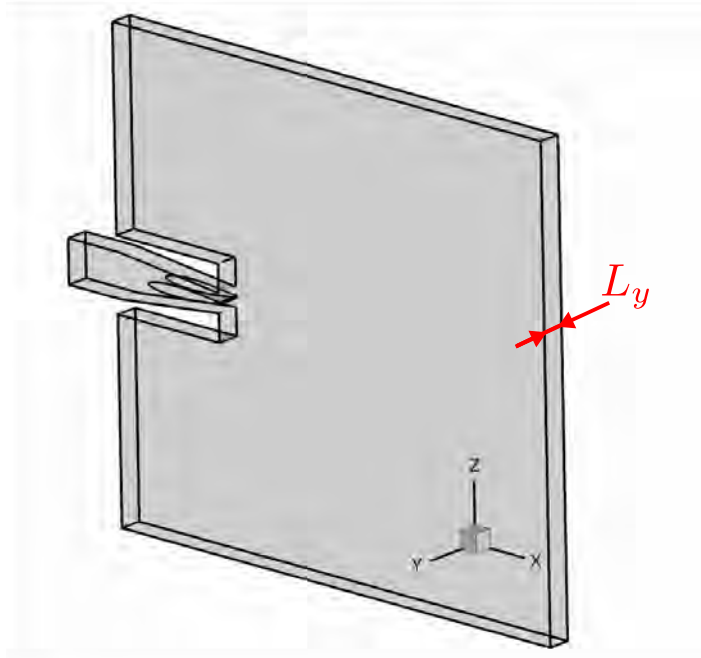


FIGURE 7.37 – Vue globale du domaine utilisé pour la simulation 3D de la configuration C_9V_{80} .

Résolutions :		N_{10}
$L_{inj.}$	$[mm]$	8
$l_{inj.}$	$[mm]$	2.5
$\Delta x_{inj.}$	$[\mu m]$	30
nb de cellules \mathcal{N}_c	—	15.8M
Δt (CFL=0.45)	$[s]$	$\approx 3E-8$
t_{total}	$[s]$	8.84E-2
nb. itérations	—	2.5E+6
t_{CPU}	$[h]$	$\approx 350\ 000$

Tableau 7.10 – Paramètres numériques de la simulation 3D pour la configuration C_9V_{80} .

oscillant du cœur liquide provoqué par la croissance d'instabilités longitudinales. Nous remarquons également l'apparition d'instabilités transversales qui conduisent à la formation de ligaments dans le sens de l'écoulement. Au cours des derniers instants, on observe la « disparition » des structures liquides détachées : celles-ci sont diffusées en quittant la zone du maillage la plus résolue, et ce jusqu'à ce que la valeur de la fraction volumique soit localement inférieure à la valeur de l'isosurface représentant l'interface.

Afin de valider qualitativement la topologie du cœur liquide simulé par le modèle bifluide, celui-ci a été comparé visuellement, sur la [Figure 7.39](#), avec une photographie de l'expérience obtenue pour la configuration C_9V_{70} ⁸. On observe un très bon accord entre la simulation et l'expérience : la formation des ligaments est bien reproduite et la distance inter-ligaments semble être du même ordre de grandeur que celle de l'expérience. Cette dernière observation suggère que les mécanismes physiques conduisant à la croissance des instabilités transversales sont correctement reproduits par le modèle bifluide. Toutefois, des observations complémentaires doivent être réalisées sur d'autres configurations afin de confirmer ce résultat.

7.3.2.2 Longueur de rupture moyenne et fréquence de battement du cœur liquide

Afin d'évaluer quantitativement les résultats numériques 3D, la longueur de rupture moyenne et la fréquence d'oscillation du cœur liquide ont été calculées. En pratique, ces valeurs ont été obtenues en extrayant les champs 2D correspondant au plan médian de la nappe, puis en appliquant la méthode de post-traitement utilisée pour la configuration 2D.

Sur la [Figure 7.40](#), nous avons comparé les résultats de simulation 3D, les résultats de simulation 2D et les résultats expérimentaux. On observe que la simulation 3D conduit à une diminution de la fréquence de battement du cœur liquide par rapport à la simulation 2D, ce résultat est donc en faveur du cas 3D. Cette conclusion doit toutefois être nuancée car la simulation 3D conduit aussi, au moins pour cette configuration, à une sur-estimation plus importante de la longueur de rupture.

Afin confirmer l'intérêt des calculs 3D, cette étude devra être poursuivie en réalisant des simulations pour d'autres conditions opératoires.

7.3.3 Résultats préliminaires des simulations 3D avec la méthodologie de couplage

Au cours de ces travaux, la méthodologie de couplage a également été mise en œuvre en réalisant une simulation 3D préliminaire de la configuration C_9V_{80} . Le principal objectif était de confirmer la robustesse et la capacité de cette méthodologie à simuler la formation d'un spray dans une configuration géométrique réaliste.

La [Figure 7.41](#) et la [Figure 7.42](#) montrent le spray obtenu sous différents points de vue. Comme pour le cas 2D, on observe que les gouttes sont produites suite au transfert des amas liquides sous-résolus du modèle bifluide vers le modèle de spray. On constate également la formation de nuages denses de gouttes (« cluster » de gouttes) qui sont vraisemblablement issus des lâchers périodiques d'amas liquides à la fréquence de battement longitudinale de la nappe.

Dans le cadre de cette thèse, le temps physique atteint par la simulation n'a pas été assez important pour qu'il soit possible d'exploiter plus en détail les résultats de ce calcul. Toutefois les premières observations montrent que les résultats sont prometteurs.

8. L'image de configuration a été prise car il n'y a pas de photographie existante pour le cas C_9V_{80}

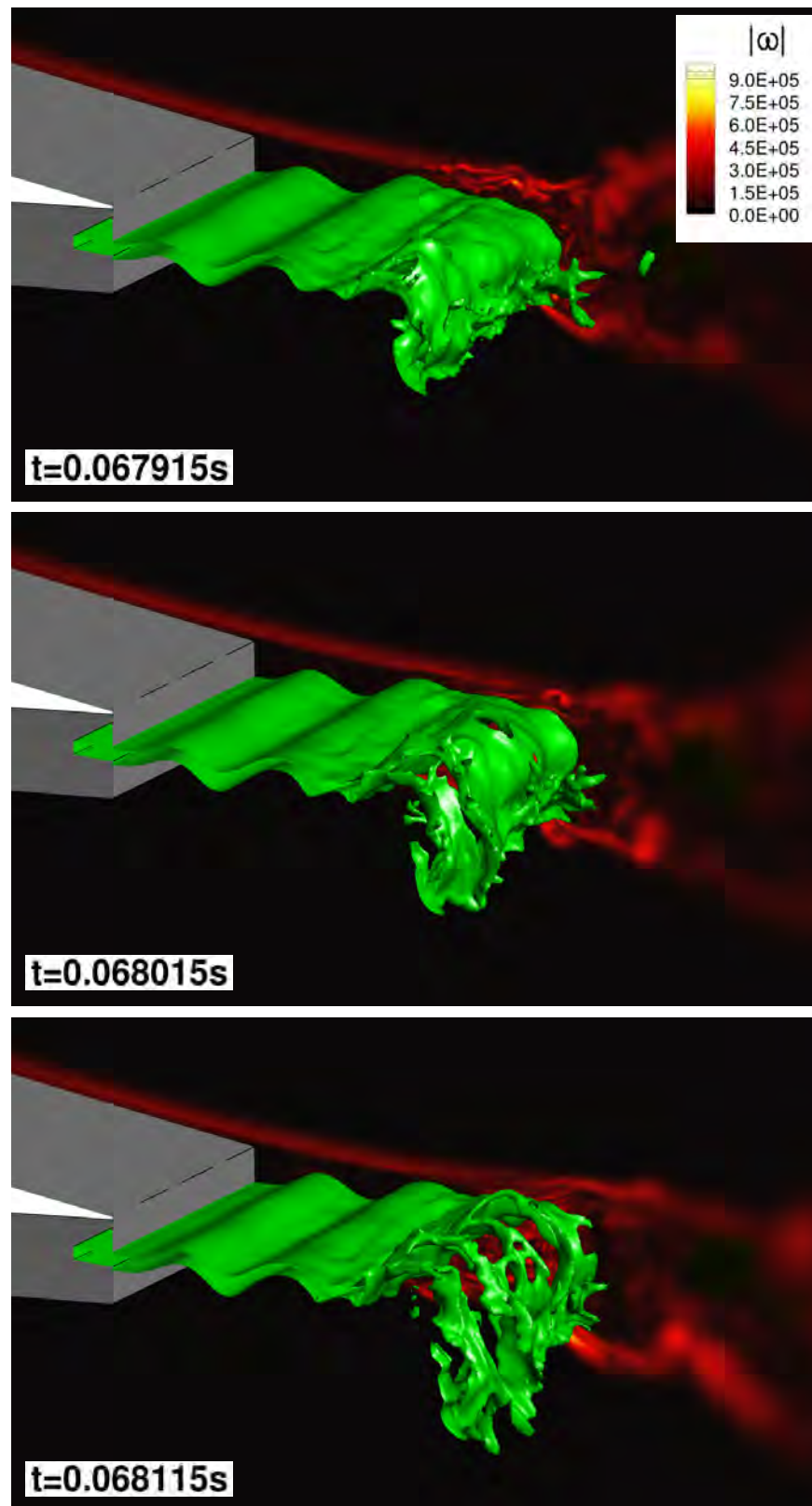


FIGURE 7.38 – (partie 1/3)

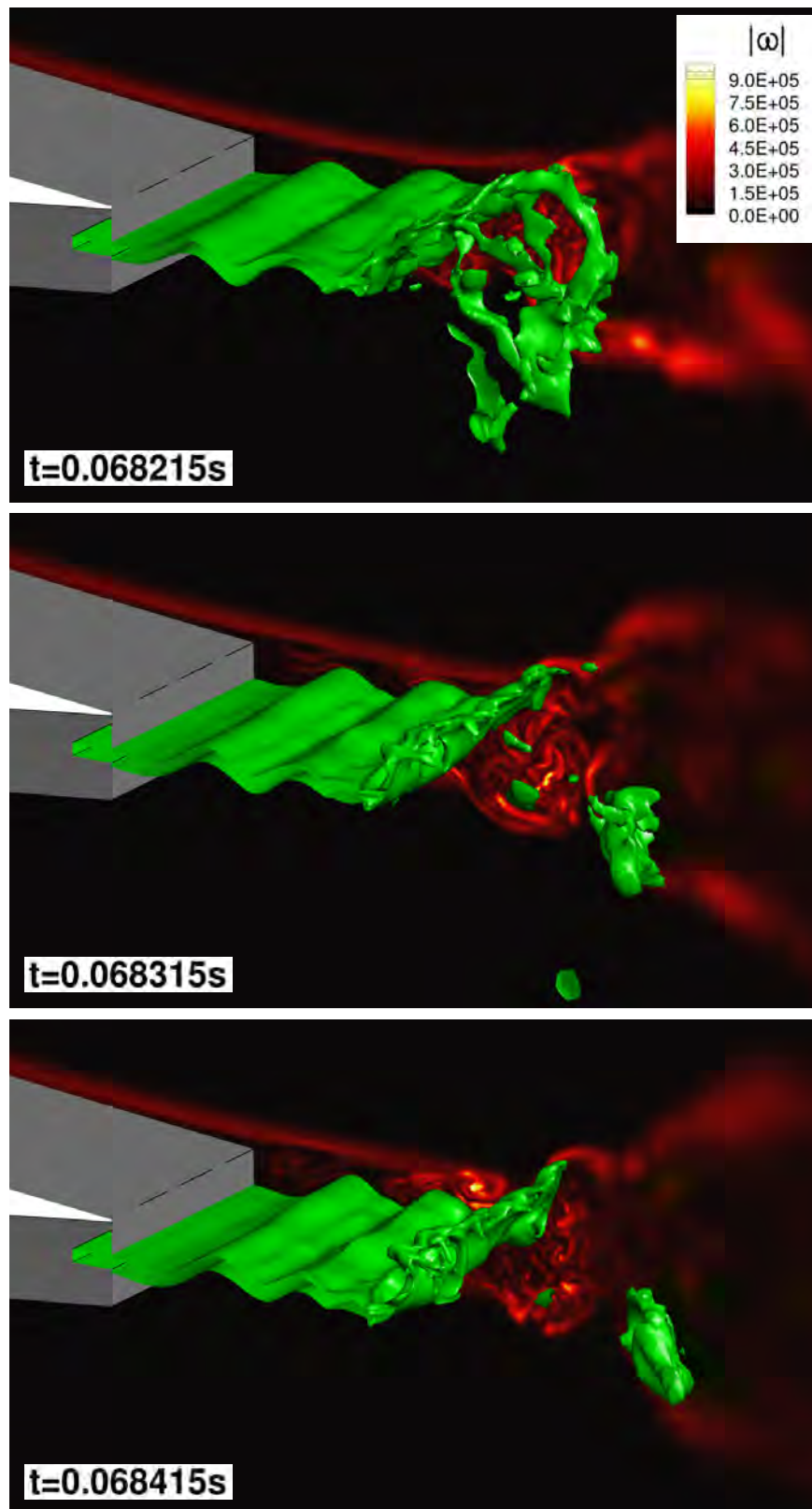


FIGURE 7.38 – (partie 2/3)

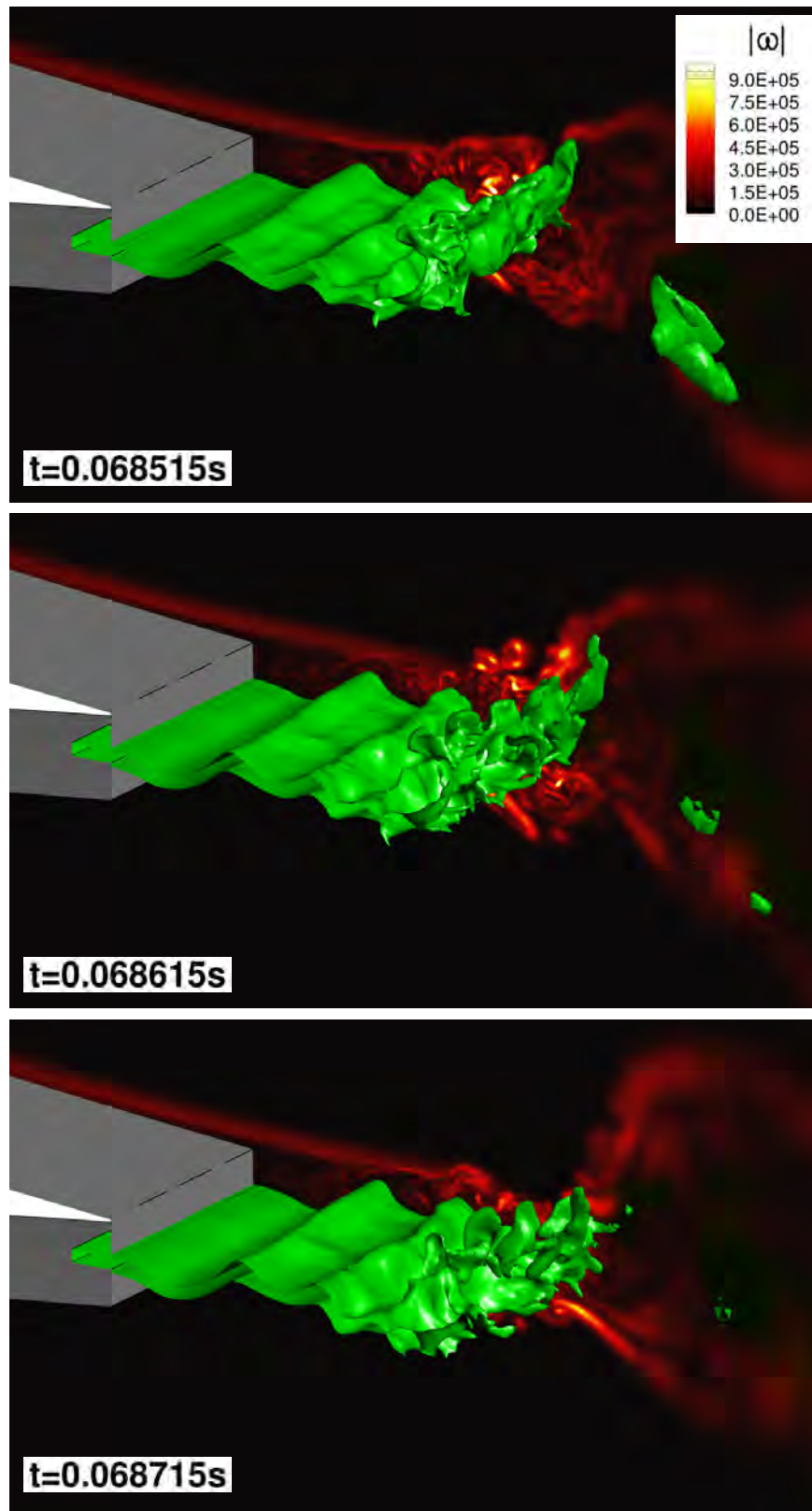
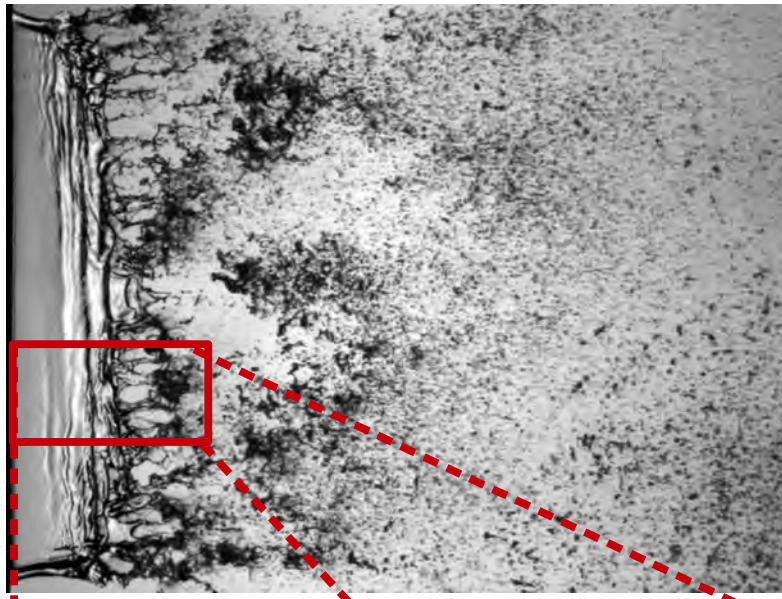
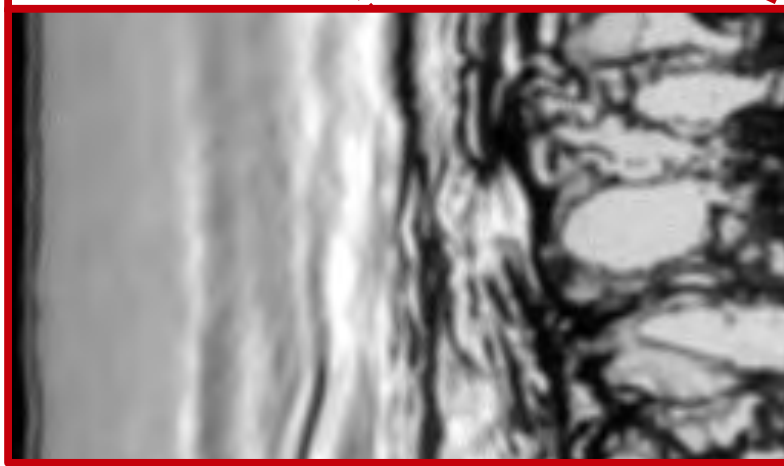


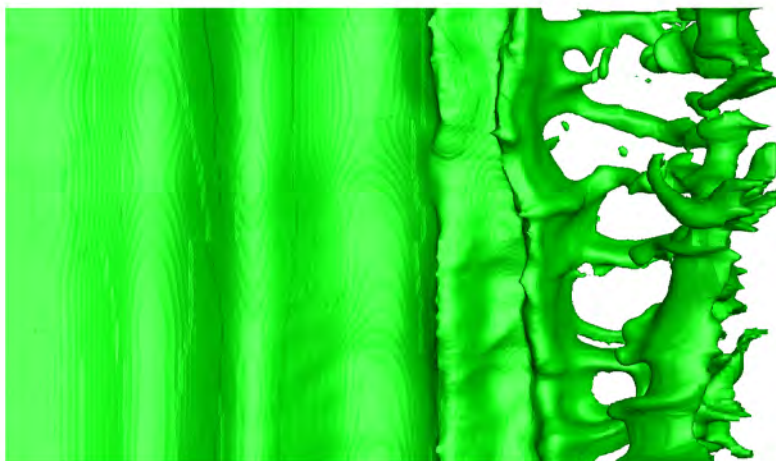
FIGURE 7.38 – (partie 3/3). Visualisation de l'oscillation globale de la nappe liquide simulée avec le modèle bifluide pour la configuration $C_9V_{80}N_{10}$



Expérience
C9V70
(vue globale)



(zoom)



Simulation
C9V80

FIGURE 7.39 – Comparaison qualitative entre la topologie du cœur liquide obtenue par la simulation 3D avec le modèle bifluide, et celle observée expérimentalement pour une configuration similaire. Vues de dessus.

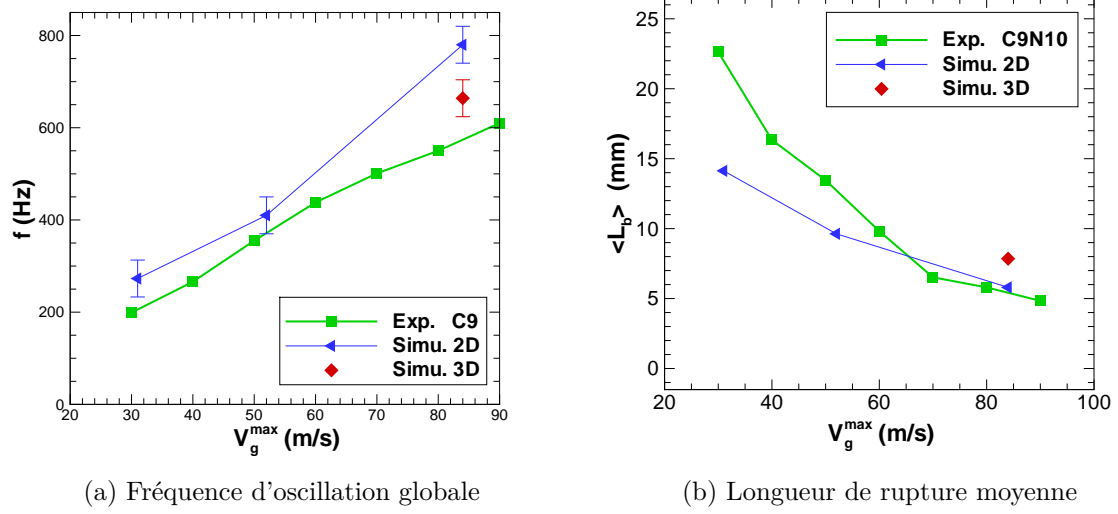


FIGURE 7.40 – Influence de la vitesse de l'écoulement d'air sur le cœur liquide. Comparaison entre les résultats de simulation 2D, 3D et expérimentaux.

7.4 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'application de la méthodologie de couplage à la simulation d'une nappe liquide cisailée. L'objectif principal était de valider en conditions réelles l'ensemble de l'approche développée. Afin de disposer de données de référence, la configuration retenue correspond à celle étudiée expérimentalement à l'Onera par Déjean [27].

Dans un premier temps, nous avons effectué un nombre important de simulations 2D qui ont permis d'étudier numériquement l'influence des conditions opératoires sur le comportement du cœur liquide. Les résultats ont montré que le modèle bifluide permet de reproduire qualitativement les mécanismes physiques principaux. D'un point de vue quantitatif, nous avons observé que la longueur de rupture moyenne du cœur liquide est sous-estimée (essentiellement pour les faibles vitesses) et que la fréquence de battement est globalement surestimée. Toutefois, ces résultats sont satisfaisants pour une approche 2D. Ensuite, la méthode de couplage a été appliquée au cas 2D afin de vérifier si celle-ci était opérationnelle et permettait de simuler globalement la création d'un spray par atomisation de la nappe liquide. A ce stade, les résultats sont très concluants même s'ils ne sont que qualitatifs.

Les premières simulations 3D ont ensuite été réalisées pour une des conditions opératoires étudiées précédemment en 2D. Un des objectifs était de prouver le bon comportement qualitatif du modèle bifluide. Les simulations 3D ont montré que celui-ci est capable de reproduire les mécanismes conduisant à la croissance d'instabilités transversales ainsi qu'à la formation de ligaments. D'un point de vue quantitatif, les résultats 3D semblent conduire à une meilleure prévision de la fréquence de battement du cœur liquide, mais ce résultat devra être confirmé par l'étude de différentes conditions opératoires. Finalement, la mise en œuvre de la méthodologie de couplage dans le cas 3D a permis de confirmer la robustesse et la capacité de celle-ci à simuler l'atomisation, depuis l'injection du cœur liquide jusqu'à la formation d'un spray, dans des configurations réalistes.

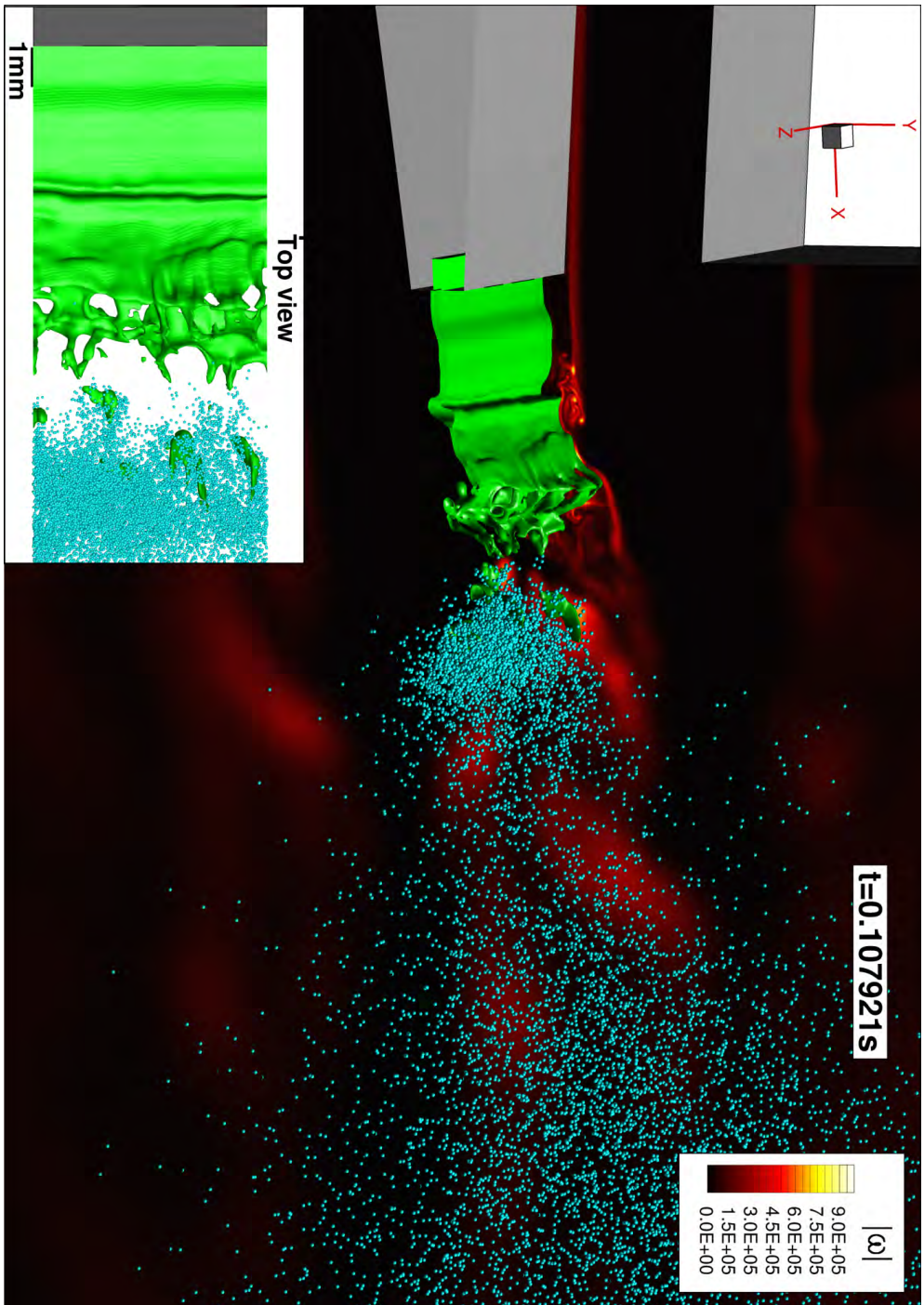


FIGURE 7.41 – Vue de côté du résultat de la simulation 3D complète de l'atomisation de la nappe liquide. Légende : isosurface ($\alpha_l = 0.2$) du cœur liquide en vert, gouttes en bleu, norme de la vorticité de l'écoulement d'air en dégradé de rouge.

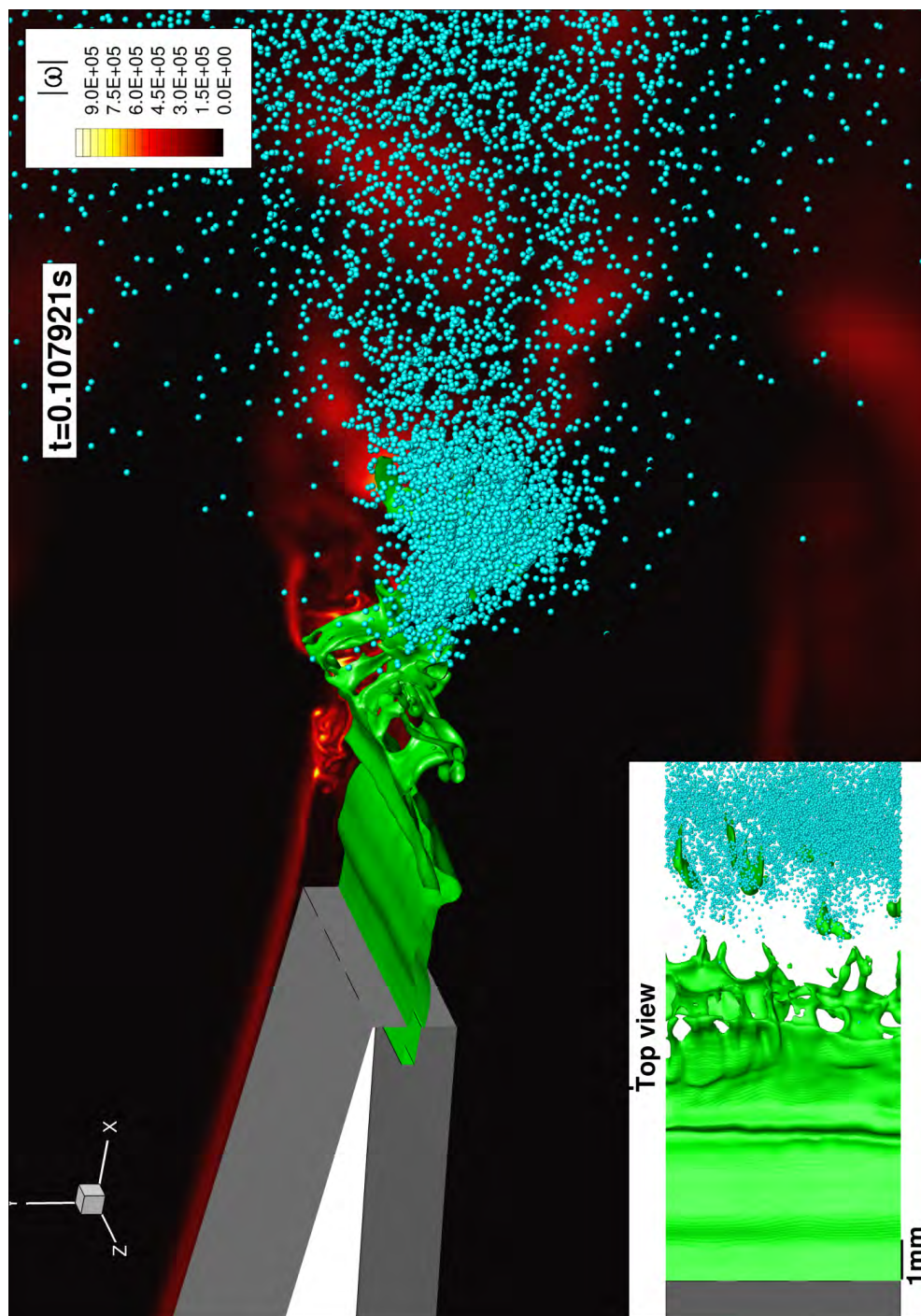


FIGURE 7.42 – Vue 3/4 avant du résultat de la simulation 3D complète de l'atomisation de la nappe liquide. Légende : isosurface ($\alpha_l = 0.2$) du cœur liquide en vert, gouttes en bleu, norme de la vortacité de l'écoulement d'air en dégradé de rouge.

Chapitre 8

Conclusions générales et perspectives

L'objectif de ces travaux était de développer une nouvelle méthodologie numérique permettant de lever le verrou lié à la modélisation du processus d'atomisation pour la simulation complète du fonctionnement d'une chambre de combustion industrielle. L'enjeu principal à terme est la possibilité de prendre en compte, grâce à la simulation, l'influence de la géométrie et des conditions opératoires sur le spray généré par le système d'injection.

Compte-tenu du caractère multi-échelle du phénomène à simuler, nous avons choisi une approche basée sur le couplage d'un modèle bifluide (pour lequel la phase gazeuse et la phase liquide sont traitées de manière symétrique comme deux phases continues) et d'un modèle de spray (pour lequel la phase liquide est traitée comme un ensemble d'inclusions sphériques).

Le modèle bifluide permet de décrire le comportement aux grandes échelles du cœur liquide présent dans la zone d'atomisation primaire située près de l'injecteur. Il est basé sur les équations de Navier-Stokes écrites pour deux fluides compressibles (barotropes), non-miscibles, newtoniens. L'interface entre les deux fluides est modélisée comme une zone de transition continue, ce qui a l'avantage de conduire à un traitement conservatif par construction (contrairement aux méthodes Level-Set) et simple à mettre en œuvre sur des maillages non-structurés généraux (contrairement par exemple aux méthodes VOF avec reconstruction géométrique de l'interface). Les effets de tension de surface sont pris en compte grâce à une formulation volumique de type CSS. D'un point de vue numérique, comme le nombre de Mach est faible dans les configurations visées, un schéma bas-Mach a été utilisé pour discrétiser les termes du premier ordre du système d'équations. Une attention particulière a également été portée à la problématique de la capture de l'interface : le développement d'un limiteur compressif a permis d'en diminuer considérablement la diffusion artificielle. Un modèle de spray, basé sur une approche statistique et discrétisé à l'aide d'une méthode particulière, a également été mis en place au cours de la thèse afin de simuler l'évolution du brouillard de gouttes issues de la fragmentation primaire du cœur liquide.

Afin de permettre l'échange d'information entre le modèle bifluide et le modèle de spray, une approche originale de couplage a été proposée et développée. Plusieurs difficultés techniques et numériques ont dû être surmontées, en particulier le fait que dans le modèle bifluide le volume occupé par la phase liquide est pris en compte dans les équations de la phase gazeuse alors qu'il ne l'est pas dans le modèle de spray. Pour y parvenir, nous avons été conduit à introduire deux systèmes d'équations auxiliaires, que nous avons appelé respectivement modèle d'atomisation et modèle de ré-impact. En permettant le transfert progressif des données entre les modèles bifluide et de spray, ils assurent la robustesse du couplage. Sur le plan physique, la modélisation retenue à ce stade est encore très simple. Dans le processus

d'atomisation, seuls le taux de cisaillement gazeux et le taux de diffusion de l'interface (que l'on peut interpréter comme un marqueur local de l'existence d'échelles sous-résolues) sont pris en compte. Il convient cependant de souligner, qu'en l'état, le modèle ne peut donc pas prédire la distribution granulométrique des gouttes produites. Celle-ci doit être prescrite par ailleurs. Pour ce qui est du ré-impact, nous avons supposé qu'il conduisait systématiquement au dépôt complet des gouttes impactantes. Cependant rien n'empêcherait, tout en conservant globalement la même formulation, de prendre en compte les régimes d'éclaboussement ou de rebond en s'appuyant par exemple sur l'introduction de nombres de Weber et de Ohnesorge calculés localement.

Tous ces développements ont été intégrés dans le code de recherche SLOSH dont la parallélisation a été une étape essentielle afin de pouvoir effectuer des simulations du processus d'atomisation dans des configurations réalistes avec des temps de calcul raisonnables. De nombreuses validations ont été effectuées sur des cas élémentaires et académiques afin de valider la capacité des modèles et des schémas numériques retenus à reproduire avec une précision suffisante les mécanismes physiques principaux mis en jeu dans l'application visée.

Enfin, afin de valider en conditions réelles l'ensemble de l'approche, nous avons réalisé des simulations de l'atomisation assistée d'une nappe liquide cisailée par un écoulement gazeux co-courant. Afin de disposer d'éléments quantitatifs de comparaison, nous nous sommes appuyés sur l'expérience réalisée à l'ONERA par Déjean [27]. Pour des raisons liées au coût et au temps de calcul, nous avons tout d'abord effectué de nombreuses simulations bidimensionnelles, ce qui nous a permis d'étudier l'influence du pas de maillage et de tester plusieurs conditions opératoires. Nous avons montré que le modèle bifluide permet, même avec seulement dix points de maillage dans l'épaisseur de la nappe, de bien reproduire qualitativement les mécanismes physiques principaux : mouvement oscillatoire longitudinal, diminution de la longueur de rupture et augmentation de la fréquence de battement avec l'augmentation de la vitesse de l'écoulement gazeux. D'un point de vue quantitatif, la longueur de rupture est assez bien retrouvée selon les cas (de 50% d'erreur pour de faibles vitesses d'écoulement d'air à 5% d'erreur pour des vitesses plus importantes) et la fréquence de battement est globalement surestimée d'environ 30%, ce qui est très encourageant compte-tenu de l'hypothèse bidimensionnelle des calculs. Nous avons également vérifié que la méthode de couplage était opérationnelle et permettait de simuler globalement la création d'un spray par atomisation de la nappe liquide. Cependant, nous n'avons pas pu réaliser de validation précise de la dynamique du spray (angle d'ouverture, distribution de flux volumique de gouttes ...) et la validation est donc encore seulement qualitative à ce stade. Pour terminer, nous avons effectué les premières simulations tridimensionnelles de l'expérience de Déjean [27] en nous limitant, faute de temps, à une seule condition opératoire. L'objectif était avant tout de prouver la faisabilité d'un tel calcul, de s'assurer du bon comportement qualitatif du modèle et si possible de montrer que la prise en compte de la troisième dimension permettait d'obtenir des résultats plus proches des mesures pour la fréquence de battement longitudinale. De ce point de vue, les résultats obtenus peuvent être considérés comme très prometteurs. Ils font clairement apparaître la capacité du modèle bifluide à reproduire également les instabilités transversales ainsi que la formation de ligaments et d'amas à l'origine de la formation des gouttes. Concernant la fréquence de battement, le calcul tridimensionnel apporte effectivement un gain significatif (d'environ 24 %) même si cela reste à confirmer par l'étude d'autres conditions opératoires. Enfin, tout comme en 2D, la méthodologie de couplage a été mise en œuvre avec succès confirmant sa robustesse et sa capacité à simuler la formation d'un spray dans des configurations géométriquement réalistes.

En conclusion, la méthodologie développée et mise en œuvre dans le code SLOSH au cours de ce travail nous paraît très prometteuse en vue de son utilisation, à moyen terme, dans un

contexte industriel. Par rapport à l'approche numérique utilisée actuellement qui consiste à injecter les gouttes sur une frontière fixe choisie arbitrairement et supposée correspondre grossièrement à la zone de création du spray, cette nouvelle méthode permet de prévoir avec une bonne précision la dépendance de la zone de production de gouttes par rapport à la géométrie du système d'injection et aux conditions opératoires et permet de plus de prendre en compte l'influence de l'instationnarité de l'écoulement gazeux sur la dynamique initiale du spray (battement, émission de gouttes par paquets ...).

Il convient cependant de reconnaître que tous les objectifs initiaux n'ont pu être atteints et qu'en particulier la méthodologie ne permet pas, en l'état, de prévoir la granulométrie du spray. Celle-ci doit être prescrite par l'utilisateur sur la base de données expérimentales, ce qui constitue une limitation importante pour les applications. Avec la poursuite du travail de validation 3D, c'est principalement sur ce point que devront porter les prochains travaux. Plusieurs pistes peuvent être envisagées. On pourrait tout d'abord essayer d'exploiter les nombreuses bases de données expérimentales existantes ou bien des résultats de DNS afin de voir s'il est possible de corréler la taille des gouttes produites à des grandeurs globales (longueur de rupture, fréquence de battement ...) ou locales (dimension caractéristique des amas ou des ligaments, taux de cisaillement ...) accessibles par le calcul grâce à la modélisation bifluide des grandes échelles de l'atomisation primaire. On pourrait également, en s'inspirant de l'approche suivie par Vallet et Borghi [95] et Chesnel *et al.* [16], ajouter dans le modèle bifluide une équation supplémentaire pour la densité d'interface qui, combinée à la fraction volumique, permettrait d'accéder à une échelle de taille dans les zones sous-résolues ou s'active le modèle d'atomisation. Cependant la fermeture des différents termes de production et de destruction dans ce type d'équation n'est pas sans difficulté et, là aussi, le recours à des données expérimentales ou de calculs DNS serait essentiel. Enfin, à plus long terme ou parallèlement, il serait également intéressant d'appliquer la méthodologie que nous avons développée à d'autres configurations d'écoulement que celle étudiée dans la thèse. En particulier, on pourrait s'intéresser à l'étude de l'atomisation d'un jet transverse (cross flow) ou d'un jet rond débouchant à grande vitesse dans de l'air au repos, qui sont des situations géométriquement plus simples pour lesquelles il existe déjà de nombreuses études numériques et expérimentales. La capacité de la méthode à traiter le ré-impact pourrait également être exploitée pour modéliser les systèmes d'injection complexes avec « prefilming ».

Bibliographie

- [1] MPI : A Message-Passing Interface standard. version 2.2, 2000. URL <http://www.mpi-forum.org/docs/mpi-2.2/mpi22-report.pdf>.
- [2] S. ADJOUA : *Développement d'une méthode de simulation de films liquides cisailés par un courant gazeux*. Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2010.
- [3] S. APTE, M. GOROKHOVSKI et P. MOIN : Les of atomizing spray with stochastic modeling of secondary break-up. *International Journal of Multiphase Flow*, 29:1503–1522, 2003.
- [4] F. ARCHAMBEAU, N. MEHITOUA et M. SAKIZ : Code saturne : A finite volume code for turbulent flows. *International Journal On Finite Volumes*, 1(1), 2004. URL <http://www.ijfv.fr/memo/JOURNAL/PRINTS/seguinleroux.pdf>.
- [5] N. ASHGRIZ et J. Y. POO : Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops. *Journal of Fluid Mechanics*, 221:183–204, 12 1990. ISSN 1469-7645. URL http://journals.cambridge.org/article_S0022112090003536.
- [6] T. BARTH et D. C. JESPERSEN : The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. *AIAA Paper 89-0366*, 1989.
- [7] T. BARTH et M. OHLBERGER : *Finite Volume Methods : Foundation and Analysis*. John Wiley & Sons, Ltd, 2004. ISBN 9780470091357. URL <http://dx.doi.org/10.1002/0470091355.ecm010>.
- [8] P. BERTHOUMIEU, H. CARENTZ et A. MULLER : Video techniques applied to the characterization of liquid sheet breakup. *In Proceedings of the 9th International Symposium On Flow Visualization.*, 2000.
- [9] P. BERTHOUMIEU, H. CARENTZ, P. VILLEDIEU et G. LAVERGNE : Contribution to droplet breakup analysis. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 20:492–498, 1999.
- [10] G. BLOKKEEL, A. MURA, FX. DEMOULIN et R. BORCHI : A continuous modeling approach for describing the atomization process from inside the injector to the final spray. *In Proceedings of the 9th conference International Conference on Liquid Atomization and Spray System (ICLASS), Sorrento (Italy)*, 2003.
- [11] J.P. BORIS, F.F. GRINSTEIN, E.S. ORAN et R.L. KOLBE : New insights into large eddy simulation. *Fluid Dynamics Research*, 10(4–6):199 – 228, 1992. ISSN 0169-5983. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016959839290023P>.

- [12] M. BOUKRA : *Amélioration de la pulvérisation d'un film liquide dans un injecteur aérodynamique par une excitation ultrasonique*. Thèse de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace., 2011.
- [13] M. BOUTOUNET : *Modèles asymptotiques pour la dynamique d'un film liquide mince*. Thèse de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace, 2011.
- [14] J. U. BRACKBILL, D. B. KOTHE et C. ZEMACH : A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100(2):335–354, juin 1992. ISSN 0021-9991. URL [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90240-Y](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(92)90240-Y).
- [15] G. CHANTEPERDRIX : *Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques à surface libre. Application à l'étude des mouvements de liquides dans les réservoirs de véhicules spatiaux*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 2004.
- [16] J. CHESNEL, Julien REVEILLON, Thibaut MENARD et Francois-Xavier DEMOULIN : Large eddy simulation of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, 21(9):711–736, 2011. ISSN 1044-5110.
- [17] C. CHEVALIER et F. PELLEGRINI : Pt-scotch : A tool for efficient parallel graph ordering. *Parallel Computing*, 34(6–8):318 – 331, 2008. ISSN 0167-8191. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167819107001342>. Parallel Matrix Algorithms and Applications.
- [18] N. CHIGIER et C. DUMOUCHEL : Atomization of liquid sheets. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, page 241, 1996. URL <http://dx.doi.org/10.2514/5.9781600866418.0241.0259>.
- [19] R. CHORDÁ, J.A. BLASCO et N. FUEYO : An efficient particle-locating algorithm for application in arbitrary 2d and 3d grids. *International Journal of Multiphase Flow*, 28(9):1565 – 1580, 2002. ISSN 0301-9322. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932202000459>.
- [20] R. CLIFT, John R GRACE et Martin E WEBER : *Bubbles, drops, and particles*. Academic Press New York, 1978. ISBN 012176950.
- [21] F. COUDERC : *Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 2007.
- [22] C. M. DAFERMOS : *Hyperbolic conservation laws in continuum physics*. Springer-Verlags, Berlin, Heidelberg, New-York, 2000.
- [23] L. DAGUM et R. MENON : OpenMP : an industry standard API for shared-memory programming. *Computational Science & Engineering, IEEE*, 5(1):46–55, 1998.
- [24] M. DARWISH et F. MOUKALLED : Convective schemes for capturing interfaces of free-surface flows on unstructured grids. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 49(1):19–42, 2006. URL <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/10407790500272137>.

-
- [25] S. DELLACHERIE : Analysis of godunov type schemes applied to the compressible euler system at low mach number. *Journal of Computational Physics*, 229(4):978 – 1016, 2010. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999109005361>.
- [26] O. DESJARDINS, V. MOUREAU et H. PITSCH : An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18):8395 – 8416, 2008. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999108003112>.
- [27] B. DÉJEAN : *Étude expérimentale de l'atomisation d'une nappe liquide avec et sans zone de préfilming en vue de sa modélisation. Influence des conditions aux limites*. Thèse de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace., 2014.
- [28] B. DÉJEAN, P. BERTHOUMIEU et P. GAJAN : Experimental study on the influence of the liquid and air thicknesses on a planar air-blasted liquid sheet. In *Proceedings of the 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, pages 337–343, 2013.
- [29] H. EROGLU et N. A. CHIGIER : Liquid jet instability in coaxial air flow. In *Proceedings of ICLASS 91, pp. 703-710, NIST, Gaithersburg, MD, July 1991*.
- [30] V. G. FERNÁNDEZ : *Experimental Study of Liquid Sheet Disintegration in a High Pressure Environment*. Thèse de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace, 2010.
- [31] Marianne M. FRANCOIS, Sharen J. CUMMINS, Edward D. DENDY, Douglas B. KOTHE, James M. SICILIAN et Matthew W. WILLIAMS : A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. *Journal of Computational Physics*, 213(1):141 – 173, 2006. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999105003748>.
- [32] C. FUREBY et F.F. GRINSTEIN : Monotonically Integrated Large Eddy Simulation of Free Shear Flows. *AIAA Journal*, 37(5):544–556, 1999. URL <http://dx.doi.org/10.2514/2.772>.
- [33] D. FUSTER, A. BAGUÉ, T. BOECK, L. LE MOYNE, A. LEBOISSETIER, S. POPINET, P. RAY, R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI : Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and vof method. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(6):550 – 565, 2009. ISSN 0301-9322. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932209000305>.
- [34] M. GARCIA : *Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur parallèle et non-structuré pour la simulation aux grandes échelles*. Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2009.
- [35] P. H. GASKELL et A. K. C. LAU : Curvature-compensated convective transport : Smart, a new boundedness- preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8(6):617–641, 1988. ISSN 1097-0363. URL <http://dx.doi.org/10.1002/flid.1650080602>.
- [36] G. H. GOLUB et C. F. VAN LOAN : *Matrix Computations (3rd Ed.)*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, USA, 1996. ISBN 0-8018-5414-8.

- [37] M. GOROKHOVSKI et M. HERRMANN : Modeling primary atomization. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 40(1):343–366, 2008. URL <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fluid.40.111406.102200>.
- [38] M. GOROKHOVSKI et V. SAVELIEV : Further analyses of kolmogorov’s model of breakup. *J. Physics of Fluids*, 15:184–192, 2003.
- [39] M. A. GOROKHOVSKI et V. L. SAVELIEV : Analyses of kolmogorov’s model of breakup and its application into lagrangian computation of liquid sprays under air-blast atomization. 15(1):184–192, 2003. ISSN 10706631. URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.1527914>.
- [40] N. GRENIER, J. P. VILA et P. VILLEDIEU : An accurate low-mach scheme for a compressible two-fluid model applied to free-surface flows. *J. Comput. Phys.*, 252:1–19, novembre 2013. ISSN 0021-9991. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2013.06.008>.
- [41] N. GRENIER et P. VILLEDIEU : Développement dans le code SLOSH d’un schéma numérique bas-Mach et d’un modèle de changement de phase. Non publié, ONERA, 2011.
- [42] D. GUEYFFIER, J. LI, A. NADIM, R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI : Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of Computational Physics*, 152(2):423 – 456, 1999. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199919896168X>.
- [43] V. GUTIERREZ FERNANDEZ, G. LAVERGNE et P. BERTHOUMIEU : Dynamic primary atomization characteristics in an airblast atomizer, high pressure conditions. *Atomization and Sprays*, 21(1):1–16, 2011. ISSN 1044-5110.
- [44] F. H. HARLOW et J. E. WELCH : Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 8(12): 2182–2189, 1965. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof1/8/12/10.1063/1.1761178>.
- [45] A. HARTEN : High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 49(3):357 – 393, 1983. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999183901365>.
- [46] M. HERRMANN : A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics*, 227(4):2674 – 2706, 2008. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999107004998>.
- [47] M. HERRMANN, M. ARIENTI et M. SOTERIOU : The impact of density ratio on the liquid core dynamics of a turbulent liquid jet injected into a crossflow. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 133(6), 2011. URL <http://dx.doi.org/10.1115/1.4002273>.
- [48] C.W. HIRT et B.D. NICHOLS : Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201 – 225, 1981. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999181901455>.

-
- [49] L.P. HSIANG et G.M. FAETH : Near limit drop deformation and secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow*, 18:635–652, 1992.
- [50] M. E. HUBBARD : Multidimensional Slope Limiters for MUSCL-Type Finite Volume Schemes on Unstructured Grids. *Journal of Computational Physics*, 155:54–74, octobre 1999.
- [51] J. J. HYLKEMA : *Modélisation cinétique et simulation numérique d'un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 1999.
- [52] D. JAMET, D. TORRES et J. U. BRACKBILL : On the theory and computation of surface tension : The elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. *J. Comput. Phys.*, 182(1):262–276, octobre 2002. ISSN 0021-9991. URL <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7165>.
- [53] J. JOUANGUY : *Modélisation phénoménologique de pulvérisation de sprays couplée à une approche LES pour la phase gazeuse*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2007.
- [54] J JOUANGUY et M GOROKHOVSKI : *Stochastic simulation of primary air-blast atomization along with LES computation of gaseous phase ; first results*. 2005.
- [55] M. LALO : *Atomisation d'un film liquide mince par action combinée des instabilités de Kelvin-Helmholtz et de Faraday. Application aux injecteurs aérodynamiques des turbo-machine aéronautiques*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace., 2006.
- [56] C. LARRICQ-FOURCADE : *Étude de la pulvérisation assistée en air d'une nappe liquide et influence d'un vent ionique sur les instabilités hydrodynamiques*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace., 2006.
- [57] C.S. LEE et R.D. REITZ : Effect of liquid properties on the breakup mechanism of high speed liquid drops. *Atomization and Sprays*, 11:1–19, 2001.
- [58] A. H. LEFEBVRE : *Atomization and Sprays*. Hemisphere publishing corporation, 1989.
- [59] B.P. LEONARD : The {ULTIMATE} conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 88(1):17 – 74, 1991. ISSN 0045-7825. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/004578259190232U>.
- [60] P. LIOVIC et D. LAKEHAL : Multi-physics treatment in the vicinity of arbitrarily deformable gas–liquid interfaces. *Journal of Computational Physics*, 222(2):504 – 535, 2007. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106003640>.
- [61] P. MACNEICE, K. M. OLSON, C. MOBARRY, R. de FAINCHEIN et C. PACKER : Paramesh : A parallel adaptive mesh refinement community toolkit. *Computer Physics Communications*, 126(3):330 – 354, 2000. ISSN 0010-4655. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465599005019>.
- [62] P. MARMOTTANT : *Atomisation d'un liquide par un courant gazeux*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2001.

- [63] D. MAVRIPLIS : Revisiting the Least-Squares Procedure for Gradient Reconstruction on Unstructured Meshes. 2003.
- [64] R. MELAND, I.R. GRAN, R. OLSEN et S.T. MUNKEJORD : Reduction of parasitic currents in level-set calculations with a consistent discretization of the surface-tension force for the CSF model. *In Proceedings of the 16th Australasian Fluid Mechanics Conference. Crown Plaza, Gold Coast, Australia*, 2007.
- [65] S. MUZAFERIJA, M. PERIC, P. SAMES et T. SCHELLIN : A two-fluid navier-stokes solver to simulate water entry. *In Proceedings of the Twenty Second Symposium on Naval Hydrodynamics*, pages 638–649, 1998.
- [66] T. MÉNARD, S. TANGUY et A. BERLEMONT : Coupling level set/vof/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5):510 – 524, 2007. ISSN 0301-9322. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932206001832>.
- [67] M. OEVERMANN, R. KLEIN, M. BERGER et J. GOODMAN : A projection method for two-phase incompressible flow with surface tension and sharp interface resolution, 2000.
- [68] S. OSHER et R. FEDKIW : *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer New York, Springer-Verlag New York, Inc., 2003. ISBN 978-1-4684-9251-4.
- [69] X. PIALAT : *Développement d’une méthode hybride eulérienne-lagrangienne pour la modélisation numérique de la phase particulaire dans les écoulements turbulents gaz-particules*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de l’Aéronautique et de l’Espace, 2007.
- [70] M. PILCH et C. ERDMAN : Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International Journal of Multiphase Flow*, 13:741–757, 1987.
- [71] L.-R. PLUMERAULT : *Modélisation numérique d’impacts de vagues sur un mur : prise en compte de la présence d’air dans l’eau*. Thèse de doctorat, Université de Pau et des Pays de L’Adour, 2009.
- [72] L.-R. PLUMERAULT, D. ASTRUC, P. VILLEDIEU et P. MARON : A numerical model for aerated-water wave breaking. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 69(12):1851–1871, 2012. ISSN 1097-0363. URL <http://dx.doi.org/10.1002/fld.2667>.
- [73] S. POPINET : Gerris : a tree-based adaptive solver for the incompressible euler equations in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 190(2):572 – 600, 2003. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999103002985>.
- [74] S. POPINET et S. ZALESKI : A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(6):775–793, 1999. ISSN 1097-0363.
- [75] T. PRINGUEY : *Large eddy simulation of primary liquid-sheet breakup*. Thèse de doctorat, University of Cambridge, 2012.
- [76] A. PROSPERETTI : Motion of two superimposed viscous fluids. *Phys. Fluids*, 24(7):1217, juillet 1981.

-
- [77] M. RAESSI et H. PITSCH : Consistent mass and momentum transport for simulating incompressible interfacial flows with large density ratios using the level set method. *Computers & Fluids*, 63(0):70 – 81, 2012. ISSN 0045-7930. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793012001326>.
- [78] A. SARTHOU, D. ZUZIO et J.-L. ESTIVALEZES : Multiscale eulerian-lagrangian method for parallel simulation of atomization induced by air-blast planar injectors. *21st AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, 2013.
- [79] N. SCHIED, P. VILLEDIEU et J.-P. VILA : A diffuse interface model for the numerical simulation of thermocapillary effects. In *Proceedings of the 9th International Symposium on Numerical Methods for Multiphase Flows*, ASME, pages 1141–1150, Paper No. FEDSM2009–78364, 2009.
- [80] N. SCHIED, P. VILLEDIEU et J.P. VILA : Programme COMPERE. Développement du code SLOSH pour la prise en compte des phénomènes thermo-capillaires. Non publié, ONERA, 2007.
- [81] N. SCHIED, P. VILLEDIEU et J.P. VILA : Programme COMPERE : Développement d’un schéma bas Mach dans le code SLOSH. Non publié, ONERA, 2009.
- [82] L. SCHILLER et Z. NAUMANN : A drag coefficient correlation. *Ver. Deutsch. Ing.*, pages 77–318, 1935.
- [83] J. SHINJO et A. UMEMURA : Simulation of liquid jet primary breakup : Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7): 513 – 532, 2010. ISSN 0301-9322. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932210000637>.
- [84] B.E. STAPPER et G.S. SAMUELSEN : An experimental study of the breakup of a two-dimensional liquid sheet in the presence of co-flow air shear. *AIAA, Paper 90-0461*, 1990.
- [85] M. SUSSMAN et E. G. PUCKETT : A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2):301 – 337, 2000. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999100965379>.
- [86] M. SUSSMAN, K.M. SMITH, M.Y. HUSSAINI, M. OHTA et R. ZHI-WEI : A sharp interface method for incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 221 (2):469 – 505, 2007. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106002981>.
- [87] S. TANGUY : *Développement d’une méthode de suivi d’interface. Applications aux écoulements diphasiques*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2004.
- [88] O. THOMINE : *Développement de méthodes multi-échelles pour la simulation numérique des écoulements réactifs diphasiques*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2011.
- [89] P. TRONTIN : *Développement d’une approche de type LES pour la simulation d’écoulements diphasiques avec interface. Application à l’atomisation primaire*. Thèse de doctorat, Institut Supérieur de l’Aéronautique et de l’Espace, 2009.

- [90] P. TRONTIN, J.-L. ESTIVALEZES, S. VINCENT et J.P. CALTAGIRONE : A phase-conditioned filtering of incompressible interfacial multiphase flow equations : A priori study for the modeling of les subgrid scale terms. *In Turbulence and Interactions*, volume 125 de *Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, pages 165–172. Springer Berlin Heidelberg, 2014. ISBN 978-3-662-43488-8. URL http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-43489-5_20.
- [91] G. TRYGGVASON, B. BUNNER, A. ESMAEELI, D. JURIC, N. AL-RAWAHI, W. TAUBER, J. HAN, S. NAS et Y.-J. JAN : A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):708 – 759, 2001. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999101967269>.
- [92] Y.-Y. TSUI, S.-W. LIN, T.-T. CHENG et T.-C. WU : Flux-blending schemes for interface capture in two-fluid flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(23–24): 5547 – 5556, 2009. ISSN 0017-9310. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931009003901>.
- [93] O. UBBINK : *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*. Thèse de doctorat, Imperial College London, 1997.
- [94] O. UBBINK et R. I. ISSA : A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes. *J. Comput. Phys.*, 153(1):26–50, juillet 1999. ISSN 0021-9991. URL <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1999.6276>.
- [95] A. VALLET et R. BORCHI : Modélisation eulerienne de l’atomisation d’un jet liquide. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series {IIB} - Mechanics-Physics-Astronomy*, 327(10):1015 – 1020, 1999. ISSN 1287-4620. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1287462000870131>.
- [96] H. A. van der VORST : BI-CGSTAB : A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13(2):631–644, mars 1992. ISSN 0196-5204. URL <http://dx.doi.org/10.1137/0913035>.
- [97] B. VAN LEER : Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 32(1):101 – 136, 1979. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999179901451>.
- [98] S. VINCENT, J. LAROCQUE, D. LACANETTE, A. TOUTANT, P. LUBIN et P. SAGAUT : Numerical simulation of phase separation and a priori two-phase les filtering. *Computers & Fluids*, 37(7):898 – 906, 2008. ISSN 0045-7930. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793007001569>. Special Issue of the “Turbulence and Interaction-TI2006” Conference.
- [99] L. VINGERT, M. HABIBALLAH, P. VUILLERMOZ et S. ZURBACH : Mascotte, a test facility for cryogenic combustion research at high pressure. Rapport technique ONERA-TP - 00-206, Office national d’études et de recherches aérospatiales, 2000.
- [100] F. A. WILLIAMS : Spray combustion and atomization. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 1(6):541–545, 1958. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof1/1/6/10.1063/1.1724379>.
- [101] S. T. ZALESKAK : Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of Computational Physics*, 31:335 – 362, 1979.

- [102] D. ZUZIO : *Direct numerical simulation of two phase flows with adaptive mesh refinement*. Thèse de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace, 2010.
- [103] D. ZUZIO, J.-L. ESTIVALEZES, P. VILLEDIEU et G. BLANCHARD : Numerical simulation of primary and secondary atomization. *Comptes Rendus Mécanique*, 341(1–2):15 – 25, 2013. ISSN 1631-0721. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631072112001672>.

Résumé

Afin d'améliorer les performances des chambres de combustion aéronautiques et réduire leurs émissions polluantes, les motoristes souhaitent contrôler au mieux l'atomisation du carburant, injecté généralement sous forme de jets ou de nappes liquides. Les essais étant longs et coûteux, leur remplacement par un outil numérique capable de simuler le processus d'atomisation permettrait non seulement une réduction des coûts importante mais faciliterait également la phase de conception. Toutefois, en raison du caractère multi-échelle du phénomène, il est difficile de le décrire dans son ensemble avec les approches habituellement utilisées en mécanique des fluides numérique.

L'objectif de cette thèse est de concevoir une nouvelle approche qui permettra à terme de simuler l'atomisation pour une configuration industrielle complète. Celle-ci consiste à coupler deux types de modèles. Le premier, dit modèle bifluide, est un modèle à deux fluides compressibles basé sur les équations de Navier-Stokes diphasiques. Celui-ci permet de décrire les grandes échelles du phénomène d'atomisation correspondant à la formation de ligaments et d'amas liquides dans la zone proche de l'injecteur. Le second, dit modèle de spray, est basé sur une équation cinétique. Dans la zone située en aval de l'injecteur, ce dernier permet de décrire de manière statistique l'évolution du brouillard de gouttelettes issues de la fragmentation primaire du jet de carburant. Le point délicat, à la fois sur le plan de la modélisation et sur celui de l'algorithmique, réside dans le couplage des deux modèles. Celui-ci a été réalisé grâce à l'introduction de deux modèles auxiliaires permettant de traiter le transfert de liquide entre le modèle bifluide et le modèle de spray par atomisation ou ré-impact.

L'approche proposée a été appliquée à la simulation numérique de nappes liquides cisaillées. Les comparaisons entre les résultats numériques et des résultats expérimentaux montrent que le modèle bifluide permet de prévoir l'influence de la géométrie et des conditions d'injection sur l'atomisation primaire de la nappe liquide. Le modèle d'atomisation permet quant à lui, de reproduire le caractère instationnaire des mécanismes de production de gouttes lors du transfert de la phase liquide depuis le modèle bifluide vers celui de spray. Des cas de ré-impact valident également la robustesse et la généralité de la méthodologie de couplage.

Mots clés : atomisation, nappe liquide, simulation numérique multi-échelle, couplage, modèle bifluide, modèle de spray

Abstract

In order to improve efficiency of aircraft combustion chambers and reduce polluting emissions, engine manufacturers try to achieve a better control on fuel atomization, which is usually injected as a jet or liquid sheet. As experiments are expensive and time consuming, a numerical tool able to simulate atomization would be a powerful asset in engine conception design. However, simulation of the whole atomization process with commonly used approach in computational fluid dynamics is still prohibitive due to the multi-scale nature of the phenomenon.

The objective of this thesis is to develop a new approach allowing the simulation of the spray formation for a industrial configuration in the near future. This involves coupling of two types of models. The first one, called two-fluid model, is based on the Navier-Stokes equations for two immiscible compressible fluids. This one is used to describe the large scales of the atomization mechanism corresponding to the formation of ligaments and liquids blobs in the near-injector area. The second one, called spray model, is based on a kinetic equation. Further downstream from the injector, this model describes statistically the evolution of the droplet cloud produced by the primary fragmentation of liquid jet. The main difficulty, in terms of both modeling and algorithmic, is the coupling of these two models. This has been achieved by introducing an atomization and an impact models which ensure liquid transfer between the two-fluid model and the spray model.

This new approach was applied to the numerical simulation of sheared liquid sheets. Comparisons between numerical and experimental results show how the two-fluid model predicts the influence of injector geometry and injection conditions on the primary atomization of the liquid sheet. Concerning droplets production, the atomization model is able to reproduce the unsteady nature of this mechanism when transferring liquid phase from the two-fluid model to the spray model. Test cases for the impact model also validate the robustness and generality of the coupling approach.

Keywords : atomization, liquid sheet, multiscale numerical simulation, coupling, two-fluid model, spray model