



HAL
open science

Modélisation des phénomènes diphasiques dans des injecteurs aéronautiques de type Airblast

Julien Carmona

► **To cite this version:**

Julien Carmona. Modélisation des phénomènes diphasiques dans des injecteurs aéronautiques de type Airblast. Sciences de l'ingénieur [physics]. INP DE TOULOUSE, 2021. Français. NNT: . tel-03675075v1

HAL Id: tel-03675075

<https://hal.science/tel-03675075v1>

Submitted on 22 May 2022 (v1), last revised 26 Jan 2024 (v2)

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

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



THÈSE

**En vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE
Délivré par l'Institut National Polytechnique de Toulouse**

**Présentée et soutenue par
Julien CARMONA**

Le 16 septembre 2021

**Modélisation des phénomènes diphasiques dans des injecteurs
aéronautiques de type Airblast**

Ecole doctorale : **MEGEP - Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés**

Spécialité : **Dynamique des fluides**

Unité de recherche :
CERFACS

Thèse dirigée par
Bénédicte Cuenot et Pierre BOIVIN

Jury

M. Stéphane Vincent, Rapporteur
M. Olivier Le Metayer, Rapporteur
M. Jean-Philippe Matas, Examineur
M. Olivier Desjardins, Examineur
Mme Bénédicte Cuenot, Directrice de thèse
M. Pierre Boivin, Co-directeur de thèse

M. Nicolas Odier, invité
M. Alain Cayre, invité

Résumé

Le secteur aéronautique se doit aujourd'hui de réduire ses émissions polluantes et sa consommation de carburants fossiles afin de proposer des moteurs compatibles avec des normes environnementales de plus en plus exigeantes. De nouvelles technologies basées sur le concept de combustion pauvre et garantissant un rendement de combustion élevé tout en limitant la production de polluants tels que les oxydes d'azote ou le monoxyde de carbone ont ainsi vu le jour. Celles-ci sont néanmoins plus sensibles aux instabilités de combustion et le système d'injection de carburant joue alors un rôle central dans le maintien de la stabilité de la flamme. De par leur capacité à offrir des performances constantes dans une gamme importante de conditions de fonctionnement, les injecteurs de type Airblast suscitent particulièrement l'intérêt des motoristes. Dans ce type d'injecteur, le carburant est introduit de façon à former un film liquide mince qui ruisselle ensuite jusqu'au bout de la lèvre d'un diffuseur, où il est enfin atomisé en fines gouttelettes. Lors de cette thèse, nous avons cherché à étudier les phénomènes physiques en jeu dans ces injecteurs, et à développer des outils numériques pour faciliter leur caractérisation. Pour atteindre ces objectifs, une méthodologie permettant de réaliser des simulations numériques directes de configurations académiques a tout d'abord été proposée. Celle-ci fut ensuite appliquée pour étudier précisément la dynamique du film liquide et du processus d'atomisation primaire dans deux configurations différentes, avec une méthode Volume Of Fluid et du solveur incompressible NGA. En parallèle, une alternative moins coûteuse, basée sur un ensemble de modèles phénoménologiques, a été développée au sein du solveur Lagrangien du code compressible AVBP. Cette dernière permet de prédire la dynamique de l'atomisation du liquide en fonction de la configuration de l'écoulement. Une part importante des travaux a consisté à développer et intégrer le modèle Automatic-PAMELA (Primary Atomization Model for prEfilming airbLAsT injectors) qui offre une formulation locale et une détermination automatique des grandeurs d'entrée du modèle d'atomisation primaire PAMELA de Chaussonnet et al. (2016). Une fois validée sur une configuration expérimentale académique, la méthodologie phénoménologique a ensuite été appliquée sur une configuration industrielle d'injecteur aéronautique de type Airblast et a, là encore, permis de retrouver les caractéristiques du spray. Bien que très efficace, cette approche souffre néanmoins d'une plage de validité restreinte limitant son utilisation à une gamme de topologies d'écoulements où les phénomènes physiques en jeu sont bien connus. Pour pallier cette limitation, une méthode diphasique basée sur une approche multifluides aux interfaces diffuses a donc, dans un troisième temps, été développée au sein du code compressible AVBP. Elle repose sur la combinaison d'un modèle à quatre équations décrivant le comportement des différents fluides, et d'une fermeture thermodynamique Noble-Able-Stiffened-Gas capable de représenter l'évolution thermodynamique en phase gazeuse et liquide. Pour éviter la diffusion numérique des forts gradients au niveau de l'interface tout en assurant la stabilité du calcul, un schéma numérique de Godunov basé sur une résolution des problèmes de Riemann par un solveur HLLC et adapté à une formulation "node-centered" a été intégré dans le code AVBP. Un important travail algorithmique a, en particulier, été mené pour implémenter une méthodologie de reconstruction MUSCL dans un contexte parallèle et ainsi, assurer une précision du schéma à l'ordre deux. Après une validation sur des cas 1D et 2D, la méthode a, finalement, été utilisée pour réaliser des simulations 2D d'un film liquide cisailé et d'un processus d'atomisation Airblast avec préfilmeur illustrant ainsi sa capacité à simuler des phénomènes physiques proches de ceux rencontrés dans les configurations d'injecteurs ciblées.

Abstract

The aeronautical sector must reduce its pollutant emissions and its fuel consumption to face the ever more stringent environmental standards. To achieve this goal, lean combustion technologies, allowing a good combustion efficiency while limiting nitrogen oxides (NO_x) and carbon monoxide (CO) emissions, are being developed. Those new generation combustors are nevertheless more likely to destabilize and the fuel injection system plays a significant part in stabilizing the flame, and thus maintaining an efficient combustion process. Because of their ability to offer stable performances for a large range of operating conditions, Airblast injectors have attracted much attention from the engine manufacturers. In such injectors, the fuel is introduced in the combustor as a thin liquid film flowing along the injector wall towards the diffuser lip, where it is finally atomized into small droplets. This PhD aimed at numerically studying the physical phenomena involved in Airblast injectors, and at developing the numerical tools allowing their characterization. With that objective, a methodology allowing to perform some direct numerical simulations of academic configurations has first been proposed. It was then applied in two distinct configurations to the study the liquid film dynamics and its atomization process using a Volume Of Fluid method and the NGA incompressible solver. In parallel, a simpler modelling method relying on phenomenological models has been developed in the Lagrangian solver of the compressible code AVBP. This approach allows to predict the atomization dynamics given the flow topology. Our main work consisted in developing and integrating the Automatic-PAMELA (Primary Atomization Model for prEfilming airbLAsT injectors) model which proposes a local formulation and an automated determination of the PAMELA primary atomization model inputs (Chaussonet, 2016). Once validated on a well characterized experimental configuration, the model was applied to an industrial Airblast injector configuration and allowed us to predict spray characteristics in line with experimentally measured. While very efficient, this approach is valid for a restricted operating range, thus limiting its application to flows where the physical phenomena involved are well known. To address this issue, a two-phase flow numerical method based on a multifluid diffuse interface approach has also been developed in AVBP during this PhD. It relies on the combination of a 4-equations multifluid model to describe the flow behavior, and a Noble-Able-Stiffened-Gas (NASG) thermodynamic closure able to represent the thermodynamic evolution in both the gaseous and the liquid phase. To avoid numerical diffusion of strong gradients at liquid/gas interface while ensuring the numerical stability, a Godunov numerical scheme with a HLLC Riemann solver designed for “node-centered” formulations has been integrated in the AVBP code. It required an important algorithmic work specially to implement a MUSCL reconstruction methodology in a high-performance computing framework, and thus ensuring a global second order accuracy. After some 1D and 2D validations, the method has finally been used to perform 2D simulations of a gas sheared liquid film and of a prefilming Airblast atomization process, highlighting its ability to address physical phenomena representative of real Airblast injector configurations.

Remerciements

Par ces quelques lignes, je tiens à remercier toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation cette thèse.

Pour commencer, je souhaite remercier Stéphane Vincent et Olivier Le Metayer pour avoir accepté de rapporter mon travail de thèse ainsi qu'à Jean-Philippe Matas et Olivier Desjardins pour avoir pris le temps de l'évaluer. Merci pour vos retours sur mon travail et, en particulier, pour les discussions très intéressantes que nous avons pu avoir durant ma soutenance.

Je tiens également à remercier Safran Aircraft Engines pour avoir financé mes travaux par l'intermédiaire d'un contrat CIFRE et le CERFACS pour m'avoir accueilli et offert un cadre de travail privilégié. Je tiens spécialement à mentionner les personnels administratifs (Michèle, Marie, Jade, et bien sûr Chantal qu'il ne faut jamais oublier de remercier dans une thèse...) et techniques, avec notre équipe informatique de choc, sans qui le travail serait impossible.

Ce travail n'aurait jamais pu voir le jour sans mes encadrants qui m'ont montré le chemin à suivre et m'ont poussé tout au long de ces 3 ans.

Bénédicte : Il y a 3 ans, nous avons débuté le diphasique ensemble avec l'objectif ambitieux de lancer une activité au CERFACS sur cette thématique. Nous avons alors exploré différentes méthodes, discuté de leurs intérêts, confronté nos avis au cours de longs points thèse et nous avons appris ensemble. Merci pour tout ça, pour la liberté que tu m'as laissée pour orienter mes travaux comme je le souhaitais et, pour m'avoir fait confiance et soutenu dans mes choix.

Nicolas : Pour toi cela n'a pas dû être évident de débarquer dans mon encadrement au bout d'un an. Tu as pourtant très vite raccroché les wagons. Merci pour ton très grand investissement dans mon travail. Nos discussions étaient toutes très intéressantes et m'ont aidé à comprendre plein de choses. Je voudrais faire une mention spéciale au temps que tu as passé à relire et commenter mes écrits. Un grand merci pour toutes tes remarques. Elles m'ont fait progresser vers toujours plus de rigueur et de clarté dans mes explications. Ton soutien psychologique quand j'en avais besoin m'a également permis de ne rien lâcher dans les moments difficiles. Bref, c'était vraiment très agréable de travailler avec toi et j'espère qu'on pourra retravailler ensemble un jour !

Pierre : Nous avons commencé à collaborer quelques temps après mon début de thèse. Notre objectif était de développer une méthode aux interfaces diffuses dans le code AVBP. Les travaux n'ont pas été faciles tous les jours, nous nous sommes heurtés à pas mal de problèmes que nous n'avions pas anticipé au début de cette aventure et je n'ai pas pu conduire les développements aussi loin que je l'aurais souhaité. Malgré certaines frustrations de mon côté, tes encouragements perpétuels et ton optimisme m'ont poussé à ne rien lâcher. Avec le recul, quand je regarde d'où nous sommes partis et là où nous en sommes maintenant, je me dis finalement que nous avons quand même abattu pas mal de boulot ! J'espère que ces travaux ne seront que le début d'une longue collaboration, que nous retravaillerons ensemble et que nous le sortirons ce calcul 3D que j'aurai bien voulu pour ma thèse !

Antony : Tu m'as encadré pendant ma première année de thèse. Nous avons initié une bonne partie de mes travaux ensemble. Merci de m'avoir aidé à lancer ma thèse sur de bons rails et de m'avoir accompagné jusqu'au dernier moment avant ton départ vers d'autres horizons professionnels. Merci beaucoup d'être venu pour la soutenance, cela m'a fait énormément plaisir de te revoir. J'étais content de pouvoir te montrer jusqu'où j'avais finalement réussi à aller.

Alain : Tu as été mon encadrant industriel durant ces 3 années de thèse. Merci pour la

confiance que tu as su m'accorder pour orienter mes travaux de thèse. Tu as toujours montré un grand intérêt pour mon travail et tu m'as permis de l'enrichir par ton point de vue industriel et ta grande connaissance des technologies d'injecteur.

Je souhaite remercier largement le personnel du CERFACS que j'ai côtoyé au quotidien durant ces 3 années. Merci à tous les chercheurs du CERFACS parmi lesquels j'adresse une mention spéciale à Gabriel et Olivier qui ont l'énorme tâche de maintenir notre principal outil de travail, le code AVBP. Merci également à tous les thésards et post-doctorants qui contribuent à faire du CERFACS un lieu agréable et vivant. Merci aux sportifs, aux "CAP and NAT guys" (Thomas, Antony, Quentin, Lucien...) ainsi qu'aux grimpeurs (Paul, Etienne, Thomas, Quentin), pour les moments de détente du midi. Enfin en 3 ans, certains thésards sont devenus plus que des collègues, des potes de galères et même des amis. Quentin, Paul, Etienne, Simon, Thomas, nous ne sommes pas sans nous revoir mais je tiens à vous remercier pour les bons moments partagés ensemble à Toulouse! Mention spéciale à Simon, mon cher cobureau à qui j'en suis certain mes chansons de 17h vont manquer atrocement. Pour les autres, j'imagine que vous êtes jaloux de ne pas avoir de "mention spéciale" mais bon, pour m'avoir supporté pendant 3 ans dans le bureau, Simon en méritait tout particulièrement une.

Je ne saurais terminer ces remerciements sans mentionner les personnes que j'ai embarquées, de gré ou de force, dans cette thèse : mon colocataire qui a notamment su écouter avec intérêt mes problèmes de thésard, ma famille dont le soutien à toujours été indéfectible ainsi que tous ceux que j'ai oublié ici... Pour terminer, je ne pourrai jamais assez remercier Léa. Ton soutien au quotidien et ton aide inestimable dans les moments difficiles m'ont permis de venir à bout de cette thèse. J'espère qu'on affrontera encore pleins de choses ensemble (ne t'inquiète je n'ai pas prévu de refaire une thèse tout de suite).

Table des matières

1	Contexte général	22
1.1	Motivations	22
1.2	Fonctionnement d'un moteur aéronautique	25
1.3	La chambre de combustion	26
1.4	Les injecteurs Airblast	28
1.5	Les phénomènes diphasiques en jeu pour la création du spray	30
1.5.1	L'écoulement du film liquide	33
1.5.2	L'atomisation primaire	39
1.5.3	L'atomisation secondaire	44
1.6	La Simulation numérique des écoulements	47
1.6.1	Les équations de Navier-Stokes	47
1.6.2	La fermeture thermodynamique	49
1.6.3	Les différentes approches de simulation	50
1.6.4	Filtrage des équations de Navier-Stokes pour la LES	55
1.6.5	La résolution numérique du système	59
1.7	La simulation des écoulements diphasiques	61
1.7.1	Les méthodes aux interfaces raides - "Sharp-interface methods"	63
1.7.2	Les méthodes aux interfaces diffuses	71
1.8	Objectifs de la thèse et structure du manuscrit	79
2	Simulation numérique haute fidélité de configurations académiques d'atomisation de type Airblast avec préfilmur	80
2.1	Introduction : Atomisation de type Airblast avec préfilmur et simulation numérique directe	80
2.2	Méthode numérique : le solveur NGA	82
2.3	Présentation de la configuration de Gepperth et al. (2012)	83
2.4	Stratégie numérique	85
2.4.1	Lien entre le critère y^+ et les paramètres de l'écoulement gazeux	86
2.4.2	Choix de la résolution spatiale du maillage	87
2.5	Résultats	89
2.5.1	Analyse de l'écoulement du film liquide	89
2.5.2	Processus d'atomisation	95
2.5.3	Conclusion de l'étude	100
2.6	Cas d'un préfilmur en forme de marche	101
2.6.1	Configuration numérique	105
2.6.2	Influence de la présence d'une marche sur la processus d'atomisation	106

2.6.3	Conclusion de l'étude	109
2.7	Conclusion du chapitre	110
3	Approche phénoménologique pour la simulation d'injecteurs de type Airblast avec Préfilmeur	112
3.1	Introduction	112
3.2	Le formalisme Lagrangien	113
3.3	Modélisation de la force de traînée	114
3.4	Traîtement du couplage entre les deux phases	116
3.5	Modèle d'écoulement de film	117
3.6	Les modèles phénoménologiques pour l'atomisation de type Airblast avec préfilmeur	120
3.6.1	Revue de quelques modèles existants	120
3.6.2	Développement du modèle Automatic-PAMELA dans AVBP	129
3.6.3	Calculs de calibration du modèle Automatic-PAMELA sur la configuration de Gepperth et al. (2012)	137
3.6.4	Calibration des constantes du modèle Automatic-PAMELA	147
3.6.5	Sensibilité du modèle aux paramètres d'entrée	152
3.6.6	Validation du modèle sur la configuration de Gepperth et al. (2012)	158
3.7	Calcul d'une configuration d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur	164
3.7.1	Configuration expérimentale	164
3.7.2	Domaine de calcul et maillage	165
3.7.3	Paramètres numériques	166
3.7.4	Présentation du modèle d'atomisation secondaire FAST	169
3.7.5	Déroulement des calculs et caractérisation de l'écoulement gazeux	172
3.7.6	Résultats du calcul diphasique	175
3.8	Conclusion du chapitre	180
4	Simulation numérique des écoulements diphasiques avec une approche aux interfaces diffuses	182
4.1	Introduction	182
4.2	Système d'équations	183
4.2.1	Modèle à 5 équations	184
4.2.2	Modèle à 4 équations	186
4.3	La fermeture thermodynamique du système	187
4.3.1	L'équation d'état Stiffened Gas	192
4.3.2	L'équation d'état Noble-Abel Stiffened Gas	193
4.3.3	Extension des équations d'état NASG au cas d'un mélange multicomposants	194
4.3.4	Problème de pas de temps pour les écoulements à faible nombre de Mach	196
4.3.5	Présentation d'une méthode d'accélération thermodynamique appliquée à la dérivation des coefficients thermodynamiques NASG pour H_2O	197
4.4	Développement d'un schéma numérique de Godunov dans le code AVBP	204
4.4.1	Le schéma numérique de Godunov	204
4.4.2	Les solveurs de Riemann	205
4.4.3	Montée en ordre : La reconstruction MUSCL	210
4.4.4	Implémentation du schéma de Godunov dans une formulation cell-vertex	213

4.5	Validation du solveur	223
4.5.1	Validation 1D	223
4.5.2	Validation 2D	229
4.6	Ajout des termes diffusifs	234
4.7	Prise en compte de la force de tension de surface	236
4.7.1	Généralités sur la force de tension de surface	236
4.7.2	Modélisation de la force de tension de surface : l'approche de Brackbill	237
4.7.3	Validation de l'implémentation de la force de tension de surface	240
4.8	Cas de démonstration : Vers la simulation de l'atomisation Airblast	249
4.8.1	Cas de film liquide cisailé	250
4.8.2	Atomisation Airblast avec préfilmeur	255
4.9	Conclusion et travaux futurs	258
5	Conclusion générale	261
A	Convergence de l'énergie cinétique dans les calculs sur la configuration de Gepperth et al. (2012)	264
B	Courbes de validation 1D de l'algorithme d'évaporation de Chiapolino et al. (2017)	267
C	Solveur de Riemann : Gestion des interfaces entre processeurs	271

Table des figures

1.1	Evolution du nombre de passagers annuellement transportés par avion entre 2014 et 2020. Le graphique est issu du rapport <i>Waypoint 2050</i> (2020).	23
1.2	Evolutions du nombre de kilomètres-passagers dans des contextes pré- et post-Covid prévues dans le rapport <i>Waypoint 2050</i> (2020).	23
1.3	Prévision de l'évolution du CO ₂ émit par le secteur aérien jusqu'en 2050 et, scénario 3 de diminution des émissions proposé dans le rapport <i>Waypoint 2050</i> (2020) de l'ATAG et intitulé "aspirational and aggressive technology perspective".	24
1.4	Cycle de Brayton théorique	25
1.5	Coupe centrale dans un turboréacteur LEAP développée par CFM (Source : https://www.safran-group.com).	26
1.6	Représentation schématique d'un secteur de chambre de combustion de turboréacteur. La figure est issue de Guedot (2015).	27
1.7	Evolution typique de la production de polluants et de la température en fonction de l'excès d'air. La figure est tirée de Felden (2017).	28
1.8	Schéma présentant les deux familles d'injecteurs de type Airblast : injecteur à jet simple ("plain jet Airblast atomizer") et un injecteur avec prefilmmeur ("pre-filming Airblast atomizer"). Les figures sont issues de Lefebvre (1980).	29
1.9	Décomposition des phénomènes physiques subis par le carburant entre son entrée dans un injecteur Airblast jusqu'à sa combustion dans la chambre. La figure est adaptée de Chaussonnet (2014).	31
1.10	Illustration du développement de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz au niveau de la surface de contact entre deux fluides co-courants	34
1.11	Développement d'une instabilité de Kelvin-Helmholtz dans l'expérience de Thorpe (1969). La photo est tirée de Van Dyke (1982).	35
1.12	Visualisation instantanée de l'évolution spatiale des instabilités sur un film liquide d'eau cisailé par un écoulement gazeux à haute vitesse. L'image est issue des observations expérimentales de Gosselin et al. (2017).	36
1.13	Cartographies des régimes de dynamique de film proposée par Peng et al. (1991) pour deux liquides de viscosités différentes (1 cP correspond à 10 ⁻³ Pa.s).	37
1.14	Illustration schématique de la dynamique des "roll waves" sur un film liquide. . .	38
1.15	Vagues d'instabilités formées sur un film liquide d'huile établi pour différentes vitesses de cisaillement d'un écoulement gazeux co-courant. L'image est tiré des observations expérimentales de Hashmi & Klingsporn (2011).	38

1.16	Configuration académique typiquement utilisée pour étudier la déstabilisation de nappe liquide (issue de Stapper et al. (1990)), à gauche, et, vues de face et de profil, tirée de Larricq-Fourcade (2006), de l'atomisation d'une nappe liquide typiquement obtenue.	39
1.17	Illustration schématique des régimes d'atomisation de nappe liquide "cellular breakup" et "stretched-ligament breakup" décrit par Stapper et al. (1990).	40
1.18	Classification des mécanismes d'atomisation primaire de nappe liquide en fonction du rapport de quantité de mouvement $M = \rho_g U_g / \rho_l U_l$ par Fernandez et al. (2009) (figure adaptée par Chaussonnet (2014)).	41
1.19	Visualisations instantanées du processus d'atomisation primaire par accumulation observé dans l'expérience de Müller et al. (2004) et Gepperth et al. (2010, 2012, 2013).	42
1.20	Atomisation primaire par accumulation observée par Shanmugadas et al. (2018) dans une configuration d'injecteur de type Airblast avec préfilmneur. Le processus appelé "liquid strands" est assimilable à un processus d'atomisation par ligament tandis que celui appelé "sheet breakup" est à rapprocher de l'atomisation en sac observée dans la configuration de Müller et al. (2004) et Gepperth et al. (2010, 2012, 2013).	43
1.21	Classification des différents régimes d'atomisation secondaire par Pilch & Erdman (1987).	46
1.22	Variation des nombres de Lewis des principales espèces dans une flamme laminaire méthane/air à la stœchiométrie. La figure est tirée de Poinso & Veynante (2005).	50
1.23	Schéma représentant l'évolution du spectre de la densité d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ pour une turbulence homogène isotrope développée en fonction du nombre d'onde k en échelle logarithmique ainsi que la distinction des zones intégrales, inertielles et de dissipation visqueuse.	52
1.24	Schéma représentant la partie modélisée et calculée du spectre de densité d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ en fonction du nombre d'onde k en échelle logarithmique dans les approches DNS, LES et RANS.	54
1.25	Représentation schématique de l'évolution temporelle de la variable X à une position donnée de l'écoulement avec les approches DNS, RANS et LES.	54
1.26	Photographie du spray de carburant SAFIR issue des travaux de Cessou et al. (2010).	62
1.27	Exemple de reconstruction d'interface avec les méthodes SLIC et PLIC.	64
1.28	Atomisation d'un jet d'eau liquide par Le Chenadec & Pitsch (2013)	65
1.29	Evolution de la forme d'une goutte initialement sphérique après 1000 itérations de réinitialisation. La goutte est résolue avec 20 points dans le diamètre. Les figures sont issues de Chiodi & Desjardins (2017b).	67
1.30	Atomisation d'un jet liquide turbulent par Chiodi & Desjardins (2017b).	67
1.31	Collision de gouttes d'eau dans l'air et simulation d'un injecteur triple disque obtenue par Janodet et al. (2020) en couplant la méthode GPMM avec une stratégie de raffinement de maillage dynamique.	68
1.32	Schéma de principe de la méthode MAC	69
1.33	Impact d'une goutte sur un film liquide par la méthode Front-Tracking GENSMAC-3D de De Sousa et al. (2004).	70

1.34	Schéma de principe de la méthode Front Tracking	70
1.35	Exemples d'application de la méthode Front-Tracking	72
1.36	Variation de la densité d'énergie f_0 en fonction du paramètre d'ordre Φ dans un système homogène constitué de deux phases	73
1.37	Simulation de l'impact d'une goutte d'eau sur un film d'eau liquide avec une méthode Phase-field par Chiu & Lin (2011)	76
1.38	Simulation de la collision de deux gouttes d'oxygène liquide à $We = 46$ avec la méthode d'épaississement TIM développée par Nayigizente et al. (2018). L'image est issue de Nayigizente (2021).	76
1.39	Simulation de l'ébullition d'eau liquide réalisée à l'aide d'une méthode multi-fluides par Le Martelot et al. (2014).	77
1.40	Simulation par une méthode multifluides de la fragmentation d'un jet d'oxygène liquide subsonique par un écoulement coaxial d'azote sous forme gazeuse issue de Chiapolino et al. (2017).	78
1.41	Simulation 3D de l'interaction entre en choc et une bulle avec un modèle multi-fluides à 4 équations réalisée par Hejazialhosseini et al. (2013).	78
2.1	Configuration expérimentale de Gepperth et al. (2012), à gauche (toutes les longueurs sont représentées en mm). Configuration numérique simplifiée, à droite. Le rectangle identifie la zone simulée dans la configuration expérimentale. La figure est adapté de Warnckle et al. (2017).	84
2.2	Raffinement de maillage dans la direction y	88
2.3	Visualisation du processus d'atomisation à trois instants consécutifs. En haute, les résultats du calcul (champ d'interface PLIC). En bas, les résultats expérimentaux.	90
2.4	Image instantanée du film liquide issue de la simulation (champ d'interface PLIC). Les points Pt1, Pt2 et Pt3 sont respectivement placé en $z = 0.25H$, $z = 0.5H$ et $z = 0.75H$ et dans cette exemple à 1cm ($0.12H$) du bord d'atomisation.	91
2.5	Spectres croisés obtenus à partir de transformés de Fourier appliquées aux points pt1, pt2 et pt3 localisés à une distance de 1 cm ($0.12H$) avant le bord d'atomisation. En noir le spectre expérimental. En gris, le spectre issu de la simulation.	92
2.6	Evolution spatiale de la fréquence dominante (ligne noir avec des points) et des spectres normalisés d'énergie de la fréquence 410Hz (ligne grise avec des points) et de la fréquence 860Hz (ligne grise avec des triangles) obtenu à partir des données de simulation.	92
2.7	Evolution spatiale du spectre de fréquences obtenu à partir des données de simulation.	93
2.8	Plan central $z = 0.5H$ coloré par le champ de VOF moyenné temporellement. La ligne avec des points correspond à la position le long de l'interface liquide/gaz où les 1000 sondes sont placés pour la construction du diagramme de Hovmöller	93
2.9	Diagramme de Hovmöller	94
2.10	Visualisations instantanées d'un processus d'appariement de deux vagues d'instabilités entre $x = 0.25H$ et $x = 0.6H$ dans le plan central $z = 0.5H$. Le pas de temps entre les images est de 6.10^{-4} s.	95

2.11	Images instantanées (a) de l’atomisation d’un ligament et (b) d’un phénomène d’atomisation par sac. En haut, les résultats issus du calcul (champ d’interface PLIC). En bas, les résultats expérimentaux.	96
2.12	Courbes d’intensité moyenne. Les lignes grises sont les courbes pour chaque images et la ligne noir en pointillés est la courbe moyenne sur toutes les images. Les points noirs représentent les points d’inflexion de la courbe moyenne.	97
2.13	Exemple d’une image expérimentale avant (gauche) et après (droite) les opérations de seuillage et de binarisation.	98
2.14	A gauche, une structure identifiée comme une goutte par l’algorithme. A droite, une structure qui est exclu par l’algorithme.	99
2.15	Fonctions de densité de probabilité de tailles de gouttes : Comparaison entre l’expérience (noir) et la simulation (gris) en utilisant différents isocontours de champ de VOF. La taille des gouttes est extraites dans une zone située entre $x = 1.7H$ and $x = 2H$ sur un échantillon de 300 images pour l’expérience et 168 images pour la simulation numérique.	100
2.16	Représentation du film liquide au point de séparation en bout de préfilmeur dans le modèle de Friedrich et al. (2008) (issue de Sadeghizadeh & Drallmeier (2018))	102
2.17	Configuration du film liquide au point de séparation en bout de préfilmeur considérée pour le modèle SAM (issue de Bacharoudis et al. (2014)).	104
2.18	Représentation d’une vague d’instabilité de film liquide avant le bord du préfilmeur dans le modèle SAM (issue de Bacharoudis et al. (2014)).	104
2.19	Domaine de calcul considéré pour le calcul d’atomisation en bout de marche. . .	105
2.20	Raffinement de maillage dans la direction y utilisé pour le calcul de la configuration de marche (Figure 2.19).	106
2.21	Visualisation instantanée en vue de 3/4 de l’atomisation (champ d’interface PLIC). A gauche, la configuration de marche. A droite, la configuration simplifié du KIT.	106
2.22	Visualisation du processus d’atomisation à trois instants consécutifs (champ d’interface PLIC). En haute, le cas dérivé de la configuration du KIT, appelée cas standard. En bas, le cas de configuration de marche.	107
2.23	Mécanisme de formation de gouttes dans le cas de la marche. A gauche, des images issues de la simulation (champ de PLIC). A droite, des images tirées des expériences de Bacharoudis et al. (2014) réalisées avec de l’eau dans de l’air. Le ratio de force FR du modèle SAM (Bacharoudis et al. 2014) est estimé à $FR = 1.52$ dans la simulation.	108
2.24	Passage d’une vague d’instabilité au bord du préfilmeur sans atomisation. A gauche, des images issues de la simulation (champ de PLIC). A droite, des images tirées des expériences de Bacharoudis et al. (2014) réalisées avec de l’eau dans de l’air. Le ratio de force FR du modèle SAM (Bacharoudis et al. 2014) est estimé à $FR = 0.46$ dans la simulation.	109
3.1	Comparaison de différentes corrélations du coefficient de traînée pour une particule isolée. La figure est issue de Massol (2004).	116
3.2	Exemple d’interpolation de la contribution d’une particule aux termes sources définis aux sommets d’une cellule.	117

3.3	Vue schématique, à droite, d'une configuration où la hauteur de film est estimée correctement par l'équation (3.20) et, à gauche, d'une autre où la formule (3.20) conduit à une hauteur de film fausse.	119
3.4	Schéma d'une goutte à l'équilibre sur une paroi pour deux angles de contacts θ_s différents. A gauche, $\theta_s < 90^\circ$. A droite, $\theta_s = 90^\circ$	120
3.5	Mécanisme d'atomisation primaire proposé par Inamura et al. (2012).	121
3.6	Mécanisme d'atomisation primaire proposé par Eckel et al. (2013).	123
3.7	Mécanisme d'atomisation primaire proposé par Chaussonnet et al. (2016).	126
3.8	Valeurs des constantes du modèle PAMELA de Chaussonnet et al. (2016).	128
3.9	Schéma illustrant l'approximation du profil de vitesse dans le film utilisée pour calculer la vitesse de cisaillement U_0 . A gauche : un profil de vitesse typique. A droite : le profil de vitesse considéré dans le modèle Automatic-PAMELA.	130
3.10	Schéma représentant les principales étapes de l'algorithme de recherche du profil de couche limite appliqué à une cellule d'accumulation. Le schéma est réalisé en 2D sur un maillage triangle pour la clarté de l'explication.	132
3.11	Profil de vitesse extrait par l'algorithme de recherche de profil appliqué par une cellule d'accumulation sur un calcul de la configuration de Gepperth et al. (2012) avec le maillage fin (présenté dans la section 3.6.3). La courbe noire représente le profil de vitesse extrait par l'algorithme où les symboles sont les points enregistrés par la sonde. La courbe grise est un profil lissé en appliquant trois fois l'équation (3.78) à tous ses points. Le cercle rouge met en évidence une inversion du gradient non-physique sur le profil d'extrait. Le trait vertical en pointillé matérialise l'épaisseur de couche limite estimée.	133
3.12	Schéma des principales étapes algorithmiques amenant à l'atomisation primaire d'une goutte par le modèle Automatic-PAMELA.	135
3.13	Schéma d'exécution de l'algorithme de création de gouttes issues d'un événement d'atomisation primaire par le modèle Automatic-PAMELA.	137
3.14	Paramètres de l'écoulement gazeux en entrée du domaine de calcul de la configuration de Gepperth et al. (2012).	138
3.15	Matrice des cas considérés pour la calibration du modèle Automatic-PAMELA sur la configuration de Gepperth et al. (2012).	138
3.16	Visualisation du domaine de simulation et des conditions aux limites utilisés pour les calculs de la configuration Gepperth et al. (2012). A gauche : Un zoom sur le convergent et le canal contenant le préfilmur. A droite : La configuration complète.	139
3.17	Paramètres des maillages de la configuration de Gepperth et al. (2012) utilisés pour la calibration du modèle Automatic-PAMELA.	140
3.18	Coupe en $Z = 0$ des différents maillages utilisés pour les calculs de la configuration de Gepperth et al. (2012).	141
3.19	Zoom sur le convergent et le canal contenant le préfilmur dans une coupe en $Z = 0$ des différents maillages utilisés pour les calculs de la configuration de Gepperth et al. (2012).	142
3.20	Paramètres numériques utilisés pour les simulations de la configuration de Gepperth et al. (2012).	143
3.21	Temps de passage de l'écoulement gazeux dans le canal pour les différents points de fonctionnement de la configuration de Gepperth et al. (2012).	143

3.22	Courbes de convergence de l'énergie cinétique dans le domaine \bar{E}_c des calculs purement gazeux de la configuration de Gepperth et al. (2012) au point de fonctionnement U60 pour les différents maillages utilisés.	144
3.23	Visualisation de l'évolution des gouttes entre leur injection et leur passage au niveau de la lèvre du préfilmur dans les calculs de calibration du modèle Automatic-PAMELA sur la configuration de Gepperth et al. (2012). La taille des gouttes est augmentée d'un facteur 10. Ces dernières sont coloriées par leur type (ptcl_type). Les gouttes qui viennent d'être injectées dans l'écoulement sont de type 1. Celle qui forment le film liquide sont de type 2. Les gouttes en accumulation au niveau de la lèvre du préfilmur sont de type 4 et prennent le type 5 une fois relâchées dans l'écoulement en aval du préfilmur.	145
3.24	Evolution des valeurs moyennes, vues par le modèle Automatic-PAMELA, du cisaillement en paroi τ_w , de la hauteur de film h_f , de la vitesse de cisaillement U_{shear} et de l'épaisseur de couche limite δ_g en fonction de la vitesse moyenne de l'écoulement. Elles sont obtenues pour les différents maillages (grossier, moyen et fin) et les deux types de liquides (Shellsol D70 et 1 :1 vol. mix. : H ₂ O-1,2-Propanediol).	147
3.25	Diamètres de Sauter D_{32} mesurés par Gepperth et al. (2012) normalisés par la hauteur de lèvre du préfilmur h_{pref} en fonction de $1/\sqrt{We_{h_{pref}}}$ (symboles), où $We_{h_{pref}}$ est un nombre de Weber basé sur l'épaisseur de la lèvre du préfilmur h_{pref} . La ligne en pointillé représente la régression linéaire sur ces valeurs.	148
3.26	Paramètres q des distributions de Rosin-Rammler issus des expériences de Gepperth et al. (2012) tracés en fonction de $1/\sqrt{We_{\delta_g}}$ (symboles), où We_{δ_g} est un nombre de Weber basé sur l'épaisseur de la couche limite de gaz δ_g . Les droites représentent les courbes	149
3.27	Evolution de la fonction $g(h_{pref})$ (eq. (3.27)) obtenue à partir des ordonnées à l'origine des droites de la Figure 3.26 en fonction de l'épaisseur de la lèvre du préfilmur h_{pref}	150
3.28	Valeurs des constantes du modèle Automatic-PAMELA.	150
3.29	Evolution des coefficients m et q de la distribution de tailles de gouttes de Rosin-Rammler et du diamètre de Sauter D_{32} en fonction de la vitesse moyenne du gaz U_g pour différentes épaisseurs de lèvre du préfilmur et différents liquides. Les courbes donnent les valeurs données par les corrélations du modèle Automatic-PAMELA tandis que le nuage de points fournit les valeurs issues des expériences de Gepperth et al. (2012).	151
3.30	Valeurs de référence pour l'étude de sensibilité : paramètres au point de fonctionnement U70D70 avec une épaisseur de préfilmur $h_{pref} = 2.5$ mm sur le maillage moyen.	152
3.31	Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de la vitesse de cisaillement gazeux U_{shear} de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30.	153

3.32 Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de la hauteur de couche limite gazeuse δ_g de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30. 154

3.33 Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30. 154

3.34 Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de la masse volumique du gaz ρ_g de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30. 155

3.35 Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de la masse volumique du liquide ρ_l de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30. 156

3.36 Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation du coefficient de tension de surface du liquide σ de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30. 157

3.37 Variation du diamètre de Sauter D_{32} prédit par le modèle Automatic-PAMELA lors de l'évolution des grandeurs d'entrée de -50% à $+50\%$ de leurs valeurs de référence. Les paramètres sont classés de la variation la plus importante à la plus faible. 158

3.38 Visualisation instantanée du spray généré par le modèle Automatic-PAMELA dans le calcul de la configuration de Gepperth et al. (2012) au point de fonctionnement $U60Prop$ avec une hauteur de préfilmeur 1 mm. La diamètre des gouttes est multiplié par un facteur 10. 159

3.39 Comparaison des diamètres caractéristiques obtenus avec le maillage moyen dans les calculs des différents points de fonctionnement de la matrice de cas 3.15 pour les épaisseurs de préfilmeur $h_{pref} = 1$ mm et $h_{pref} = 2.5$ mm avec les données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014). 161

3.40 Comparaison des densités de probabilité volumique de tailles de gouttes obtenues avec le maillage moyen dans les calculs des différents points de fonctionnement de la matrice de cas 3.15 pour $h_{pref} = 1$ mm avec, d'une part, les données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014) et, d'autre part, les calculs avec le modèle PAMELA réalisés par Chaussonnet et al. (2016). 162

3.41	Comparaison des densités de probabilité volumique de tailles de gouttes obtenues lors du calcul du point de fonctionnement $U40D70$ pour $h_{pref} = 1$ mm avec les maillages grossier, moyen et fin, d'une part, et les données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014), d'autre part.	163
3.42	Comparaison des diamètres caractéristiques D_{32} , D_{v10} et D_{v90} obtenus lors du calcul du point de fonctionnement $U40D70$ pour $h_{pref} = 1$ mm avec les maillages grossier, moyen et fin, d'une part, et les données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014), d'autre part. . .	163
3.43	Schéma de coupe dans le plan $Z = 0$ de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.	164
3.44	Repères des mesures PDPA expérimentales réalisées pour caractériser le spray issu de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.	165
3.45	Comparaison des grandeurs caractéristiques du Kérosène et du Méthanol.	165
3.46	Visualisation du domaine de simulation et des conditions aux limites utilisés pour caractériser l'injecteur aéronautique du type Airblast avec préfilmeur. . . .	167
3.47	Maillage du domaine de simulation du cas d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.	168
3.48	Paramètres numériques utilisés pour les simulations de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.	169
3.49	Modèles Lagrangiens utilisés pour les simulations de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.	169
3.50	Temps de passage de l'écoulement gazeux à travers le domaine de simulation, d'une part, et l'injecteur, d'autre part, pour le point de fonctionnement considéré pour la simulation numérique d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.	172
3.51	Evolution de l'énergie cinétique \bar{E}_c dans le domaine obtenue à partir du calcul purement gazeux du points de fonctionnement à 4% PdC de la configuration d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.	173
3.52	Coupe en $Z = 0$, censurée et déformée, de l'écoulement gazeux en sortie d'injecteur pour le point de fonctionnement à 4% PdC. L'écoulement est colorié par sa vitesse moyenne (a) axiale ou (b) tangentielle. La vitesse axiale est définie comme la composante de la vitesse selon l'axe X tandis que la vitesse tangentielle correspond à la composante selon l'axe Z . Les lignes représentent des isocontours de vitesse. La vitesse est nulle le long de la ligne blanche.	174
3.53	Visualisation instantanée, censurée et déformée, du spray généré par l'injecteur industriel de type Airblast avec préfilmeur. La diamètre des gouttes est multiplié par un facteur 20.	176
3.54	Evolutions du diamètre de Sauter adimensionnalisé D_{32}^* dans les plans P1, P2 et P3 selon les droites $Y = 0$ et $Z = 0$ obtenues pour le point de fonctionnement considéré de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Le diamètre de Sauter est adimensionnalisé par une valeur arbitraire commune aux différentes courbes. Les résultats de simulation sont représentés par les lignes tandis que ceux issus des expériences sont matérialisés par des points.	178

3.55	Evolutions des vitesses adimensionnalisées axiales U_{ax}^* (selon l'axe X) et radiales U_r^* des gouttes dans les plans P1, P2 et P3 selon les droites $Y = 0$ et $Z = 0$ obtenues pour le point de fonctionnement considéré de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Les vitesses sont adimensionnalisées par une valeur arbitraire commune aux différentes courbes. Les résultats de simulation sont représentés par les lignes tandis que ceux issus des expériences sont matérialisés par des points.	179
4.1	Représentation schématique d'un volume élémentaire dans le contexte du modèle à 4 équations : Chaque composant occupe son propre volume quel que soit son état thermodynamique. ρ , P et T sont respectivement la masse volumique, la pression et la température du mélange local. La figure est issue de Deng & Boivin (2020).	187
4.2	Diagramme de phase typique pour une espèce pure. Le point C représente le point critique. Le point t indique le point triple où il y a une coexistence des trois phases.	188
4.3	Evolution du facteur de compressibilité Z pour différents fluides lorsque la pression varie le long d'un isotherme à $0^\circ C$. $Z = 1$ pour toutes les pressions correspond à la théorie des gaz parfaits. Notons que le comportement thermodynamique des fluides est reproduit par la théorie des gaz parfait $Z = 1$ lorsque la pression relative est faible (tend vers 0). La figure est issue de Atkins & De Paula (2006).	189
4.4	Evolution du facteur de compressibilité Z pour différents fluides lorsque la pression réduite $P_r = P/P_c$ varie le long d'un isotherme à $T_r = T/T_c$ dont la valeur indiquée sur la courbe. Les symboles représentent les valeurs expérimentales tandis que les lignes sont construites à partir de la loi de Van der Waals. P_c et T_c représentent les valeurs critiques (point C dans le diagramme (P, T) de la Figure 4.2). La figure est issue de Atkins & De Paula (2006).	190
4.5	Diagramme de Clapeyron (P, v) typique pour une espèce pure. Le point C représente le point critique. Les isothermes à T_c et à $T < T_c$ sont les courbes classiquement prédites avec les lois d'état cubiques. La zone spinodale en gris appartient au dôme de saturation dont le reste est hachuré.	192
4.6	Evolution de la vitesse du son dans un mélange diphasique eau/air à pression 1 bar et température 293 K en fonction de la fraction massique de liquide selon l'approximation de Wood (1930)	196
4.7	Evolution de l'enthalpie h de l'eau H_2O avec la température T à une pression $P_0 = 1$ bar (en haut) et en fonction de la pression P à une température $T_0 = 300$ K (en bas). Les courbes de référence (traits noirs avec ronds blancs) sont issues de NIST (https://www.nist.gov). Les traits noirs sans symboles sont des régressions linéaires réalisées à partir des courbes de référence. Dans la figure du haut, la régression a été réalisée en ne considérant que la partie de la courbe en phase liquide.	199

4.8 Evolution de la masse volumique ρ , de l'énergie interne e et de l'enthalpie h de l'eau H_2O en fonction de la température T à une pression $P_0 = 1$ bar. Les courbes de référence (traits noirs avec ronds blancs) sont issues de NIST (<https://www.nist.gov>). Les traits noirs sans symboles et en gris pointillés sont respectivement les valeurs prédites par les équations d'état NASG avec des coefficients issus d'une dérivation sans modification (NASG) et avec modification de la vitesse du son (modified NASG). 201

4.9 Evolution de la capacité calorifique de l'eau H_2O en phase gazeuse à volume constant C_v en fonction de la température T à une pression $P_0 = 1$ bar. La courbe de référence (trait noir avec des ronds blancs) est issue de NIST (<https://www.nist.gov>). La droite en pointillée correspond à la calorifique C_v déterminée à partir de la méthode proposée par Boivin et al. (2019) (méthode 2). 202

4.10 Evolution de l'enthalpie h de l'eau H_2O avec la température T à une pression $P_0 = 1$ bar. La courbe de référence (trait noir avec ronds blancs) est issues de NIST (<https://www.nist.gov>). Le trait noirs sans symboles est la droite de régression linéaire réalisée en considérant la partie de la courbe de référence en phase gazeuse. 203

4.11 Coefficients NASG pour l'eau H_2O déterminés dans la gamme de températures [275-475 K] et de pressions [0.5-5 bar] avec (modified H_2O_l) et sans (H_2O_l) modification de la vitesse du son dans le liquide. 203

4.12 Solution initiale type d'un problème de Riemann. 205

4.13 Configurations d'ondes possibles du systèmes d'Euler. (a) et (d) correspondent à des configurations supersoniques tandis que (b) et (c) sont des configurations subsoniques. 207

4.14 Structure d'ondes dans le solveur HLL. Le rectangle rouge est un exemple de volume de contrôle considéré pour le calcul de la vitesse U_{HLL} 209

4.15 Structure d'onde dans le solveur HLLC. 210

4.16 Schéma présentant un exemple de reconstruction MUSCL en 1D. Les pointillés représentent l'ordre 1 tandis que les lignes illustrent la reconstruction MUSCL obtenue. Les points sont les valeurs au centre des cellules. 210

4.17 Schéma présentant un exemple de configuration de reconstruction MUSCL en 1D à l'origine de problème d'oscillation dans le schéma. Les pointillés représentent l'ordre 1 tandis que les lignes illustrent la reconstruction MUSCL obtenue. Les points sont les valeurs au centre des cellules. 211

4.18 Schéma de stabilité de différents limiteurs 213

4.19 Définition du volume dual et des normales au face associées pour un maillage constitué de triangles. 214

4.20 Définition d'une normale \vec{n}_{ij}^D à l'une des faces des volumes duaux à partir des normales aux faces des cellules pour des éléments de forme quadrilatères ou tétraédriques. 215

4.21 Exemple de configuration considérée sur un maillage triangle pour l'estimation du flux à travers la face de normale \vec{n}_{ij}^D . ∇W_{ij}^{Down} et ∇W_{ij}^{Up} représentent les gradients des variables primitives utilisés dans la reconstruction MUSCL. Ils sont calculés aux centres de gravité G_C^{Down} et G_C^{Up} des cellules amont et aval. . . 216

4.22 Schéma de stabilité du limiteur implémenté dans AVBP 218

4.23	Normales aux différentes faces des volumes duaux contenues dans une cellule triangulaire.	219
4.24	Volume dual au bord du domaine dans le cas d'un maillage triangle.	219
4.25	Réponse du filtre F en fonction de la longueur d'onde normalisée et du nombre d'itérations de filtrage $N = N_{filt}$. La figure est tirée de Schmitt (2020).	222
4.26	Comparaison des résultats obtenus avec le solveur de Riemann HLLC d'AVBP (ligne rouge) avec ceux de Chiapolino (ligne bleu) et de RADIS (ligne noire) pour un cas de tube à choc diphasique avec l'air en proportion majoritaire. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s ⁻¹ , $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 1.073.10^{-2}$, $Y_{1,r} \approx 1.186.10^{-3}$, $Y_{2,l} \approx 9.263.10^{-3}$, $Y_{2,r} \approx 1.881.10^{-2}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 0.98$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1 ms.	225
4.27	Comparaison des résultats obtenus avec le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'AVBP (ligne rouge) avec ceux de Chiapolino (ligne bleu) et de RADIS (ligne noire) pour un cas de tube à choc diphasique avec l'air en proportion majoritaire. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s ⁻¹ , $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 1.073.10^{-2}$, $Y_{1,r} \approx 1.186.10^{-3}$, $Y_{2,l} \approx 9.263.10^{-3}$, $Y_{2,r} \approx 1.881.10^{-2}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 0.98$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1 ms.	226
4.28	Comparaison des résultats obtenus avec le solveur de Riemann HLLC d'AVBP (ligne rouge) avec ceux de Chiapolino (ligne bleu) et de RADIS (ligne noire) pour un cas de tube à choc diphasique avec le liquide en proportion majoritaire. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s ⁻¹ , $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 0.9999899$, $Y_{1,r} = 0.9999898$, $Y_{2,l} = 9.45.10^{-8}$, $Y_{2,r} = 1.919.10^{-7}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 10^{-5}$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1.5 ms.	227
4.29	Comparaison des résultats obtenus avec le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'AVBP (ligne rouge) avec ceux de Chiapolino (ligne bleu) et de RADIS (ligne noire) pour un cas de tube à choc diphasique avec le liquide en proportion majoritaire. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s ⁻¹ , $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 0.9999899$, $Y_{1,r} = 0.9999898$, $Y_{2,l} = 9.45.10^{-8}$, $Y_{2,r} = 1.919.10^{-7}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 10^{-5}$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1.5 ms.	228
4.30	Isocontours de masse volumique obtenues après un temps $\tau = 0.3$ lors de la simulation du problème de Riemann. Les Figures 4.30a, 4.30b et 4.30c sont issues de calculs avec le solveur HLLC MUSCL d'AVBP et contiennent 60 lignes d'isocontours tandis que la Figure 4.30d est tirée de Deng et al. (2019).	230
4.31	Solution initiale du cas test de convection de vortex 2D.	232
4.32	Norme relative de l'erreur obtenue à partir du champs d'énergie totale après une convection de 2 cm d'un vortex isentropique 2D pour différents schémas convectifs et pour différentes résolutions de maillage.	233
4.33	Ordre de convergence de l'erreur des schémas Lax-Wendroff, HLLC et HLLC MUSCL obtenus sur le cas de convection de vortex isentropique sur un maillage constitué de triangles équilatéraux. L'ordre est déterminé à partir des pentes des courbes en Figure 4.32 avec l'erreur donnée par les trois maillages les plus fins (512×512 , 1024×1024 et 2048×2048).	233

4.34	Evolution de la masse volumique d'un mélange diphasique eau/air à pression 1 bar et température 293 K en fonction de la fraction massique de liquide (gauche) et fraction volumique de liquide (droite).	238
4.35	Schéma du cas test de loi de Laplace	240
4.36	Coefficients thermodynamiques NASG pour les espèces $H_2O(l)$, $O_2(g)$ et $N_2(g)$ déterminés à partir d'une référence NIST (https://www.nist.gov) dans la gamme de température [275-475 K] et pour une pression 1bar.	241
4.37	Champs de pression à l'équilibre.	242
4.38	Profil de la différence de pression à l'équilibre le long de l'axe en pointillé dans la Figure 4.37. A gauche, le profil complet. A droite, le profil agrandi dans la zone centrale de la goutte.	242
4.39	Schéma du cas test de goutte oscillante	243
4.40	Snapshots présentant l'évolution de la forme de la goutte pendant une période d'oscillation coloré par le fraction volumique de liquide vf_liq	244
4.41	Oscillation au cours du temps du diamètre a de la goutte (ligne noire) autour du diamètre d'équilibre de la goutte (ligne rouge pointillée).	245
4.42	Exemple de carte des régimes de collision obtenue par Ashgriz & Poo (1990) à partir de gouttes d'eau de même diamètre.	246
4.43	Exemple de collision de deux gouttes de liquides dans les différents régimes. Ces visualisations expérimentales sont extraites de Jiang et al. (1992).	247
4.44	Schéma du cas test de collision de deux gouttes	248
4.45	Snapshots de la collision de deux gouttes à $We = 80$ simulé en 2D. vf_liq représente le fraction volumique de liquide.	249
4.46	Schéma de la configuration expérimentale de Raynal (1997). La figure est extraite de Fuster et al. (2013).	250
4.47	Schéma du domaine de calcul utilisé pour la simulation numérique de l'expérience de Raynal (1997).	252
4.48	Coefficients thermodynamiques NASG pour les espèces $H_2O(l)$, $O_2(g)$ et $N_2(g)$ déterminés à partir d'une référence NIST (https://www.nist.gov) dans la gamme de température [275-475 K] et pour une pression 1bar. Les coefficients thermodynamiques pour $H_2O(l)$ correspond à ceux donnés dans le Tableau 4.11 sous l'appellation "modified H_2O_l " dont la dérivation inclut une diminution de la vitesse du son pour augmenter le pas de temps de la simulation (voir partie 4.3.5).	252
4.49	Visualisation instantanée du film liquide après 1 s de temps de simulation. vf_liq représente le fraction volumique de liquide. La ligne blanc correspond à l'iso-contour $vf_liq = 0.5$ tandis que la ligne rouge en pointillé donne la position d'enregistrement de la hauteur du film liquide pour la mesure de la fréquence de l'instabilité axiale.	253
4.50	Comparaison de l'évolution spatiale de la hauteur du film liquide en dix instants répartis uniformément entre les temps physiques 0.9 s et 1 s (croix noire) avec la droite d'évolution théorique donnée par l'équation (4.157) (ligne rouge). La figure de gauche présente le résultat obtenu avec AVBP tandis que celle de droite donne le résultat de Agbaglah et al. (2017) issu d'une simulation avec une approche VOF.	255

4.51	Spectre de fréquences obtenu en appliquant une transformation de Fourier (FFT) au signal d'évolution de la hauteur de film au cours du temps enregistré à une position axiale $x = 3H_l$. La ligne en pointillée donne la position de la fréquence théorique de l'instabilité axiale dominante déterminée à l'aide de l'équation (4.156).	256
4.52	Schéma du cas d'atomisation Aiblast avec préfilmeur.	256
4.53	Snapshots présentant la dynamique de la phase liquide dans la configuration d'atomisation Airblast avec préfilmeur après 35 ms, 37 ms et 39 ms de temps physique. La quantité <code>vf_liq</code> visualisée correspond à la fraction volumique de liquide. Afin de faciliter l'observation, les images sont zoomées sur une zone d'intérêt du domaine de simulation.	257
4.54	Fragmentation d'un jet d'oxygène liquide par un écoulement coaxial d'azote à haute vitesse issu de Chiapolino et al. (2017).	260
A.1	U40	265
A.2	U70	266
B.1	Comparaison des résultats obtenus avec (ligne pointillée) et sans (ligne pleine) évaporation en utilisant le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'AVBP (rouge) avec ceux de Chiapolino (bleu) pour un cas de tube à choc diphasique avec l'air en proportions majoritaires. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s ⁻¹ , $T_l \approx 354$ K, $T_r \approx 337$ K, $Y_{1,l} = Y_{1,r} = 0.1$, $Y_{2,l} = Y_{2,r} = 0.2$ et $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 0.7$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1 ms.	268
B.2	Comparaison des résultats obtenus avec (ligne pointillée) et sans (ligne pleine) évaporation en utilisant le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'AVBP (rouge) avec ceux de Chiapolino (bleu) pour un cas de tube à choc diphasique avec l'air en proportions majoritaires. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s ⁻¹ , $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 1.073.10^{-2}$, $Y_{1,r} \approx 1.186.10^{-3}$, $Y_{2,l} \approx 9.263.10^{-3}$, $Y_{2,r} \approx 1.881.10^{-2}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 0.98$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1 ms.	269
B.3	Comparaison des résultats obtenus avec (ligne pointillée) et sans (ligne pleine) évaporation en utilisant le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'AVBP (rouge) avec ceux de Chiapolino (bleu) pour un cas de tube à choc diphasique avec le liquide en proportions majoritaires. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s ⁻¹ , $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 0.9999899$, $Y_{1,r} = 0.9999898$, $Y_{2,l} = 9.45.10^{-8}$, $Y_{2,r} = 1.919.10^{-7}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 10^{-5}$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1.5 ms.	270
C.1	Volume dual construit sur un maillage triangle et séparé par la frontière entre les processeurs $P1$ et $P2$	272
C.2	Illustration de la recopie au niveau du noeud i des gradients calculés au centre des cellules $C1$ à $C7$	273

Liste des tableaux

2.1	Points de fonctionnement du banc expérimental du KIT considérés dans la thèse	84
2.2	Propriétés physiques des liquides considérés dans la thèse.	84
2.3	Tableau des nombres sans-dimensions considérés.	85
2.4	Conditions de fonctionnement et nombres sans dimension correspondant.	87
4.1	Capacités calorifiques à pression constante $C_{p,g}$ et volume constant $C_{v,g}$ de l'eau H_2O en phase gazeuse obtenues avec la méthode 1 et la méthode 2. γ_g correspond au rapport de ces capacités calorifiques.	202
4.2	Coefficients NASG pour l'eau et l'air déterminés dans la gamme de températures [273-500 K] par Chiapolino et al. (2017).	224

Chapitre 1

Contexte général

1.1 Motivations

Depuis le premier vol contrôlé d'un engin motorisé le 17 décembre 1903 par les frères Wright, l'utilisation des avions a connu une croissance gigantesque si bien qu'ils sont aujourd'hui considérés comme un moyen de transport à part entière. Selon l'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (OACI), 4.5 milliard de personnes voyageaient dans les airs à travers le monde en 2019 parcourant plus de 8 686 milliards de kilomètres cumulés, soit environ 217 000 fois le tour du monde. En 2020, la fermeture des frontières engendrée par la crise sanitaire mondiale du Covid-19 a eu pour effet de stopper net le trafic aérien plongeant le secteur aéronautique dans la plus grave crise de son histoire (Figure 1.1). Selon un communiqué de l'Association du Transport Aérien International (IATA) daté du 29 septembre 2020, le trafic aérien mondial aurait ainsi chuté de 66% par rapport à 2019. La baisse du nombre kilomètres-passagers parcourus aurait même atteint 94.3% au plus fort de la crise en avril 2020 par rapport au même mois de l'année 2019, selon un communiqué du 3 juin 2020 émanant de cette même organisation. Aujourd'hui, en 2021, la levée très progressive des mesures sanitaires et les réticences contextuelles des passagers à voyager trop loin de chez eux engendrent une reprise poussive du secteur à tel point que la plupart des analystes suggèrent que le niveau d'avant la pandémie ne pourra être retrouvé avant 2024. Pourtant, malgré cette crise, l'intensification grandissante des échanges entre nos économies mondialisées ainsi que l'essor des pays asiatiques permettent d'envisager le retour d'une croissance significative et ainsi, de l'augmentation du nombre d'avions en service. Ces conclusions sont notamment portées par le groupe d'action du transport aérien (ATAG) composé des principaux industriels du secteur. En effet, dans un rapport publié en 2020 et intitulé Waypoint 2050, l'ATAG prévoit certes une diminution de 16% du nombre de kilomètres-passagers en 2050 par rapport aux prédictions pré-Covid mais, entrevoit tout de même plus que son doublement dans les 30 prochaines années (Figure 1.2).

La croissance du trafic aérien n'est, malheureusement, pas sans conséquence sur l'environnement puisque celui-ci est à l'origine de l'émission d'un grand nombre de polluants parmi lesquels on retrouve majoritairement du dioxyde de carbone (CO_2) mais aussi du monoxyde de carbone (CO), des oxydes d'azote (NO_x), des suies ou encore des imbrûlés. Ainsi, en 2019, le secteur aérien représentait à lui seul environ 900 millions de tonnes de CO_2 , soit entre 2% et 3% des émissions mondiales de ce gaz à effet de serre, et les dernières prévisions de l'ATAG tablent sur un doublement de ces émissions à l'horizon 2050 (Figure 1.3). Pour lutter contre cette augmentation, les industriels du secteur aérien ont depuis 2008 l'objectif ambitieux de

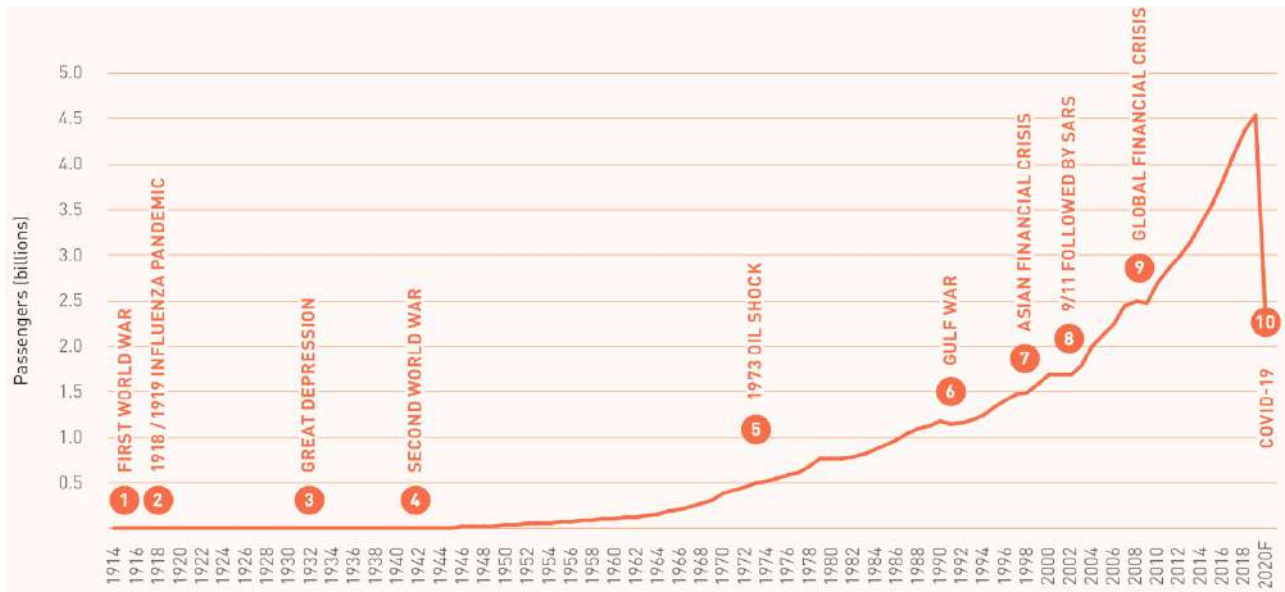


FIGURE 1.1 – Evolution du nombre de passagers annuellement transportés par avion entre 2014 et 2020. Le graphique est issu du rapport *Waypoint 2050* (2020).

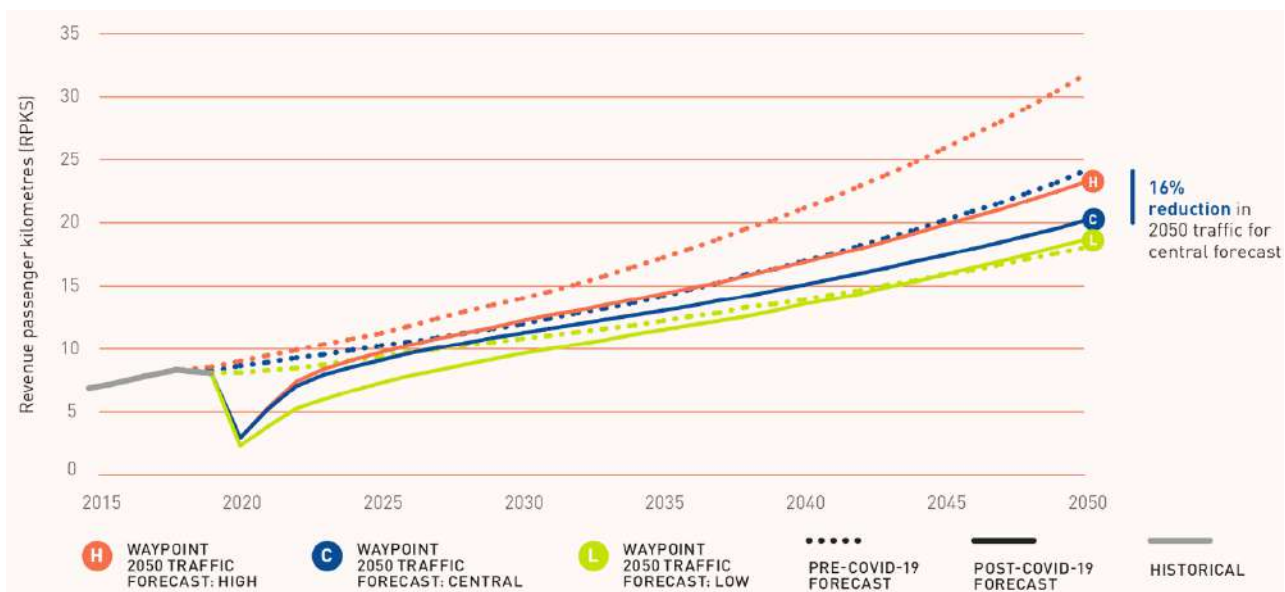


FIGURE 1.2 – Evolutions du nombre de kilomètres-passagers dans des contextes pré- et post-Covid prévues dans le rapport *Waypoint 2050* (2020).

réduire les émissions de CO₂ de 50% par rapport à 2005, ce qui équivaut à une amélioration de 90% des émissions moyennes par kilomètre par passager. Pour atteindre cet objectif, le rapport *Waypoint 2050* (2020) a étudié 3 scénarii s'appuyant sur 3 leviers d'action identifiés :

- L'amélioration des infrastructures et l'optimisation des opérations ;
- Les améliorations technologiques ;
- Le déploiement de carburant moins polluants couramment appelés Sustainable Aviation Fuel (SAF).

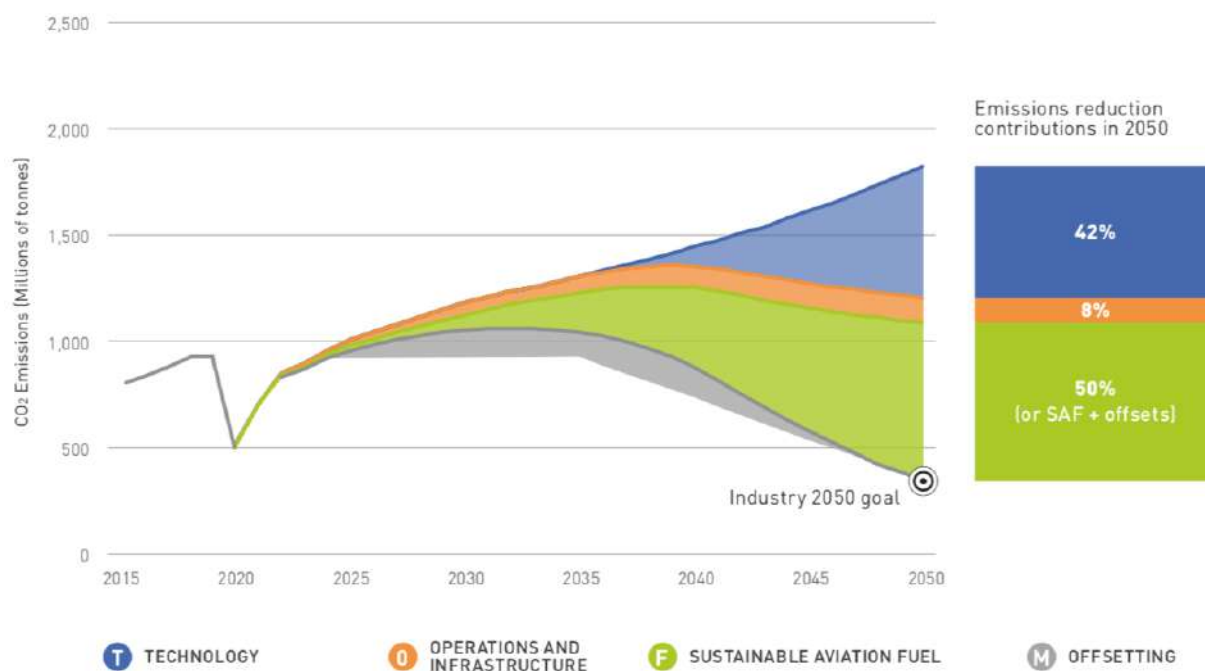


FIGURE 1.3 – Pr evision de l’ volution du CO₂  mit par le secteur a rien jusqu’en 2050 et, sc nario 3 de diminution des  missions propos  dans le rapport *Waypoint 2050* (2020) de l’ATAG et intitul  "aspirational and aggressive technology perspective".

Bien que le premier levier ne doive pas  tre n glig , il ne permet de diminuer les  missions que d’environ 10% dans les diff rents sc narii propos s par l’ATAG. Comme le montre le sc nario 3 en Figure 1.3, la tenue des objectifs d’ missions pour 2050 est en fait majoritairement conditionn e aux am liorations technologiques et aux d ploiements des SAF. Ces deux volets n cessitent cependant un effort de d veloppement sans pr c dent pour l’industrie a ronautique qui doit trouver des solutions pour concevoir des moteurs ultra-efficaces capables   la fois de moins consommer et de fonctionner avec 100% de carburants d carbonn s. A l’horizon 2040, les industriels comptent sur le d ploiement de solutions technologiques de rupture, comme les architectures open-rotors ou l’utilisation d’hydrog ne, pour permettre une d carbonation du secteur. Cependant,   court terme, le secteur pr voit de r duire ses  missions gr ce au d veloppement de la production et de l’utilisation de carburants durables (issus de la biomasse) ou synth tiques verts (issus d’hydrog ne d carbon ). Cette strat gie n cessite un important travail de R&T pour assurer la compatibilit  de ces carburants avec les moteurs existants, optimiser leur fonctionnement et permettre d’alterner l’utilisation de diff rents carburants dans un m me moteur. La baisse de la consommation est  galement un enjeu important. En effet, outre le volet environnemental, elle conjugue des aspects  conomiques et industriels majeurs. Economiques d’abord car elle contribue   diminuer les co ts pour donner un avantage comp titif aux SAF par rapport aux carburants classiques. Industriels ensuite car elle doit permettre de compenser en partie la croissance de la demande mondiale de SAF. Selon Nicolas Jeuland¹, en charge des prospectives environnementales et du d veloppement des carburants alternatifs chez Safran, le besoin de SAF pour 2050 est estim    500 millions de tonnes (Mt) par an. Or, bien qu’il ne

1. Pr sentation sur "la r duction de l’empreinte environnementale de l’aviation" du 7 avril 2021 au colloque INCA

soit pas souvent mentionné, l'un des points bloquant à l'utilisation des SAF reste la capacité de les produire à grande échelle. Comme le résume bien Nicolas Jeuland¹ : "500 Mt en 2050 est techniquement et industriellement atteignable". Le but est cependant de "faire en sorte que ces 500 Mt ne se transforment pas en 900 Mt".

1.2 Fonctionnement d'un moteur aéronautique

De nos jours, la propulsion des avions commerciaux est pour l'essentiel assurée par des turboréacteurs. Ces moteurs appartiennent à la famille des turbines à gaz et fonctionnent donc sur le principe du cycle thermodynamique de Brayton. Le cycle de Brayton, illustré en Figure 1.4, est constitué d'une suite de quatre transformations élémentaires :

- 1-2 Compression isentropique
- 2-3 Combustion isobare
- 3-4 Détente isentropique
- 4-1 Détente isobare

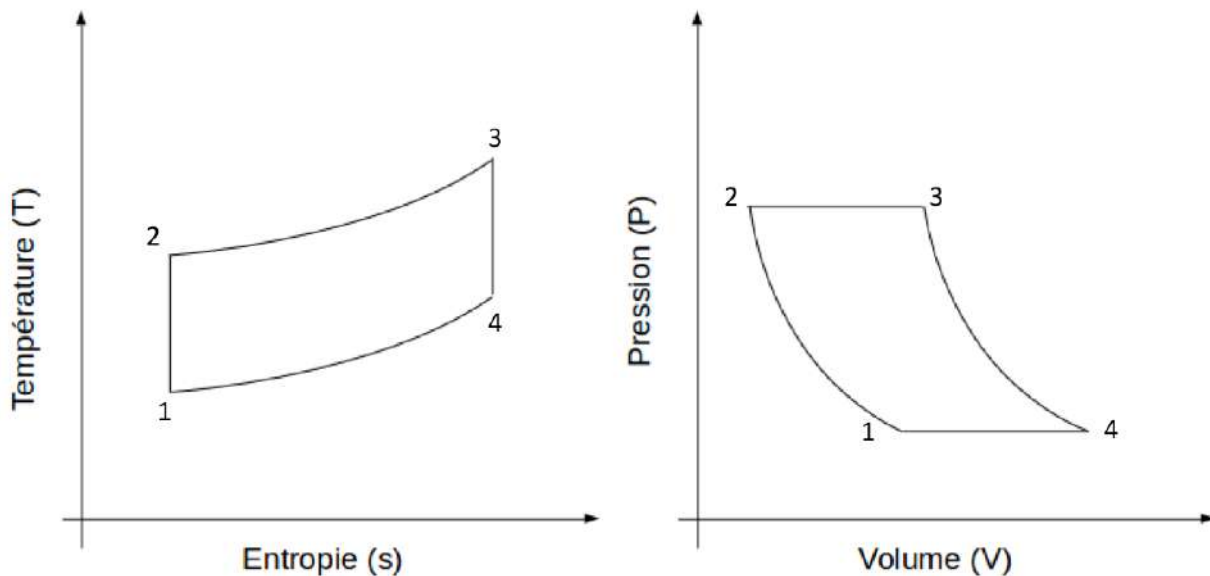


FIGURE 1.4 – Cycle de Brayton théorique

Il convient de remarquer que le cycle thermodynamique présenté ici revêt un caractère idéal. Les transformations ne sont en pratique pas parfaitement isentropiques ou isobares du fait des différentes pertes thermiques et mécaniques dans le moteur.

Afin de produire l'énergie mécanique nécessaire pour assurer la poussée, le turboréacteur est constitué d'un ensemble d'éléments permettant de faire subir à l'air qui entre dans le moteur les différentes transformations du cycle thermodynamique. La Figure 1.5 présente la visualisation de ces différents éléments. Un soufflante, également appelée fan, est tout d'abord responsable de l'admission de l'air dans le turboréacteur. Puis, une partie du flux d'air aspiré, appelée flux primaire, est comprimée par les étages des compresseurs basse et haute pression, tandis que, l'autre, appelée flux secondaire, s'écoule jusqu'à la sortie du moteur sans subir de transformation. L'air comprimé arrive ensuite dans une chambre de combustion où il est mélangé avec un

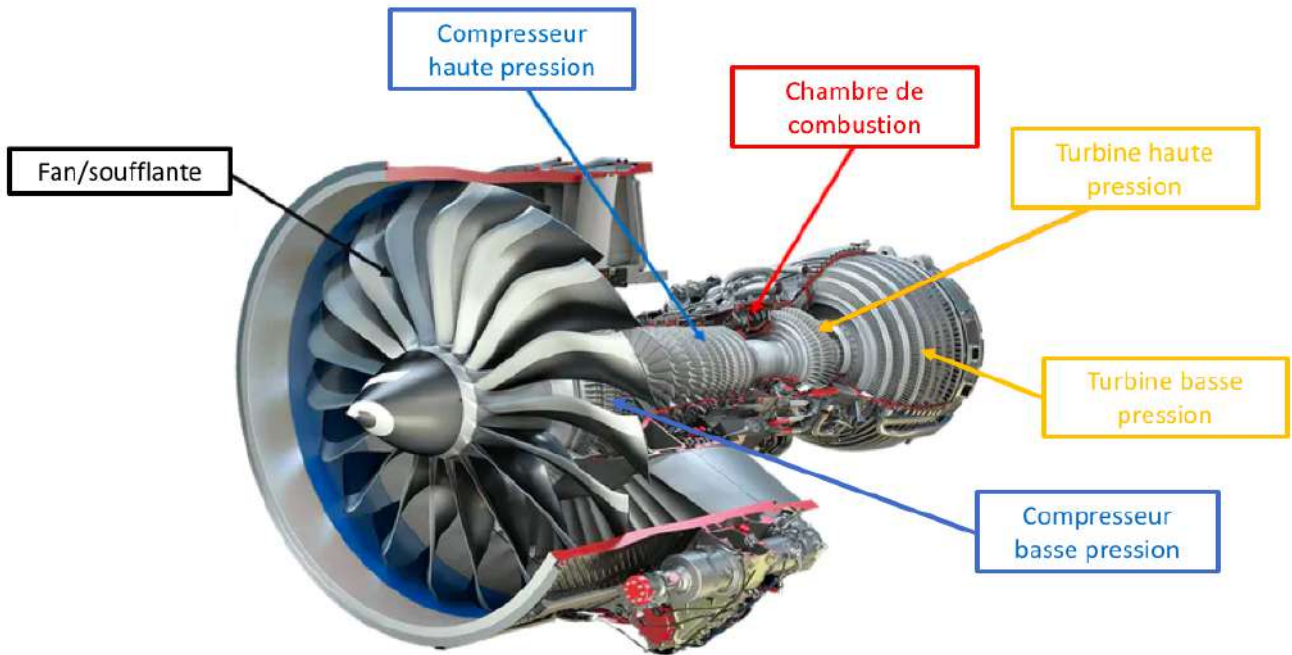


FIGURE 1.5 – Coupe centrale dans un turboréacteur LEAP développée par CFM (Source : <https://www.safran-group.com>).

carburant avant d'être brûlé. Les gaz brûlés résultants de la combustion de l'air et du carburant sont, ensuite, détendus à travers les étages des turbines haute et basse pression afin de récupérer le travail mécanique nécessaire à la mise en rotation du moteur. La poussée générée par les turboréacteurs modernes est, quant à elle, produite pour environ 20% par le flux primaire et 80% par le flux secondaire. Ces proportions peuvent varier d'un moteur à l'autre en fonction du rapport des débits entre les flux secondaire et primaire, également appelé taux de dilution. Ainsi, plus le taux de dilution d'un moteur est élevé, plus le pourcentage de la poussée générée par le flux secondaire est grand. Il convient ici de noter que l'augmentation du taux de dilution a pour conséquence de diminuer la quantité de carburant nécessaire pour obtenir une poussée donnée ce qui permet d'améliorer le rendement global du moteur. La tendance est, donc, à la hausse de ce taux à chaque nouvelle génération de moteur. A titre d'exemple, ce taux s'élevait à 6 pour le CFM 56 développé par le consortium CFM tandis que, le moteur de nouvelle génération LEAP affiche un taux de 11 (<https://www.safran-group.com>). La principale limitation à l'augmentation de ce taux réside actuellement sur la capacité à concevoir des pales de soufflante toujours plus grandes tout en conservant de bonnes propriétés de rigidité mécanique et la possibilité d'intégrer le moteur sous les ailes des avions.

1.3 La chambre de combustion

La chambre de combustion est un élément central dans le fonctionnement d'un turboréacteur puisqu'elle est responsable de l'apport d'énergie nécessaire à sa mise en rotation. Elle est généralement de forme annulaire et composée de plusieurs secteurs identiques alimentés par leurs propres dispositifs d'injection. La Figure 1.6 offre une représentation schématique d'un de ces secteurs.

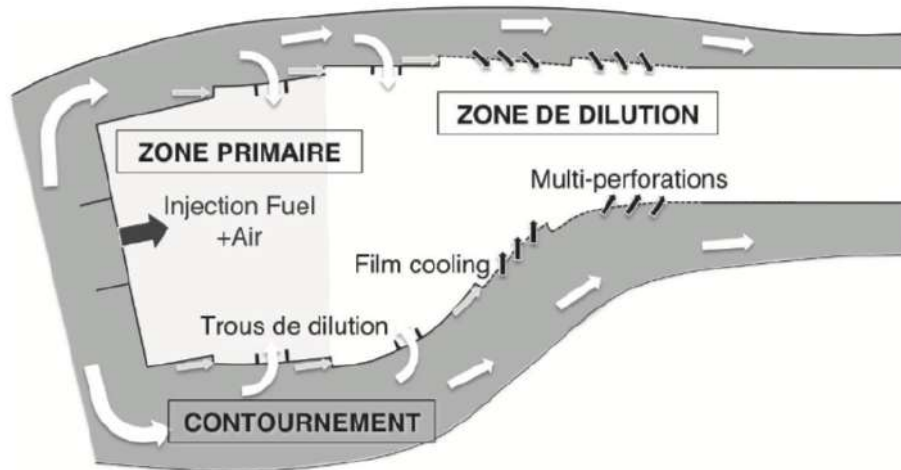


FIGURE 1.6 – Représentation schématique d'un secteur de chambre de combustion de turbo-réacteur. La figure est issue de Guedot (2015).

Lorsque l'air sort du dernier étage du compresseur, une partie de celui-ci est dirigée vers le système d'injection où il est utilisé pour atomiser le carburant en fines gouttelettes. Le spray de carburant formé est, ensuite, mélangé à l'air puis, est brûlé dans la zone primaire. Les gaz brûlés issus de la combustion pouvant atteindre des températures supérieures à celles de la tenue des matériaux de la chambre (typiquement ≈ 2200 K), une partie de l'air froid, qui contourne la chambre, est utilisée pour la refroidir. La température des gaz brûlés est ainsi diminuée et homogénéisée en injectant cette air froid via des trous de dilution. Ce dernier est également utilisé pour refroidir les parois de la chambre à travers différents dispositifs :

- Le "Film cooling" : L'air froid est injecté par une ou plusieurs rangées de trous tangentiels à la paroi permettant la formation d'une couche d'air frais le long de celle-ci.
- Les "multi-perforations" : L'air froid est injecté dans la chambre à travers une multitude de petits trous inclinés. Cette technologie permet non-seulement un refroidissement de la paroi par la formation d'un film d'air froid à sa surface mais aussi par un effet de pompage thermique créé par le passage de l'air dans les trous.

Siège de la combustion, la chambre de combustion constitue l'un des enjeux majeurs pour améliorer le rendement et réduire les émissions polluantes du moteur. L'optimisation de sa conception soulève cependant un nombre important de contraintes et d'exigences parfois antagonistes. L'augmentation de la pression dans la chambre favorise par exemple le rendement thermodynamique du moteur mais, conduit dans le même temps à une augmentation de la température, et donc de la production d'oxydes d'azote (NOx), en sortie de chambre de combustion, ce qui pose des problèmes pour la tenue des matériaux et accroît les émissions du moteur. Un bon compromis entre rendement, émissions polluantes et contraintes de conception semble cependant pouvoir être obtenu grâce à la combustion du carburant en régime pauvre (i.e. avec un large excès d'air). En effet, comme le montre la Figure 1.7, ce régime de combustion permet de diminuer à la fois la température des gaz brûlés et la formation de monoxyde de carbone (CO), de NOx, de suies et d'hydrocarbures imbrûlés. La combustion en régime pauvre est toutefois prône aux instabilités de combustion et thermo-acoustique. En tant que responsable du mélange du carburant avec l'air, le système d'injection joue alors un rôle central dans le maintien de la stabilité de la flamme et de l'efficacité de la combustion. La distribution de

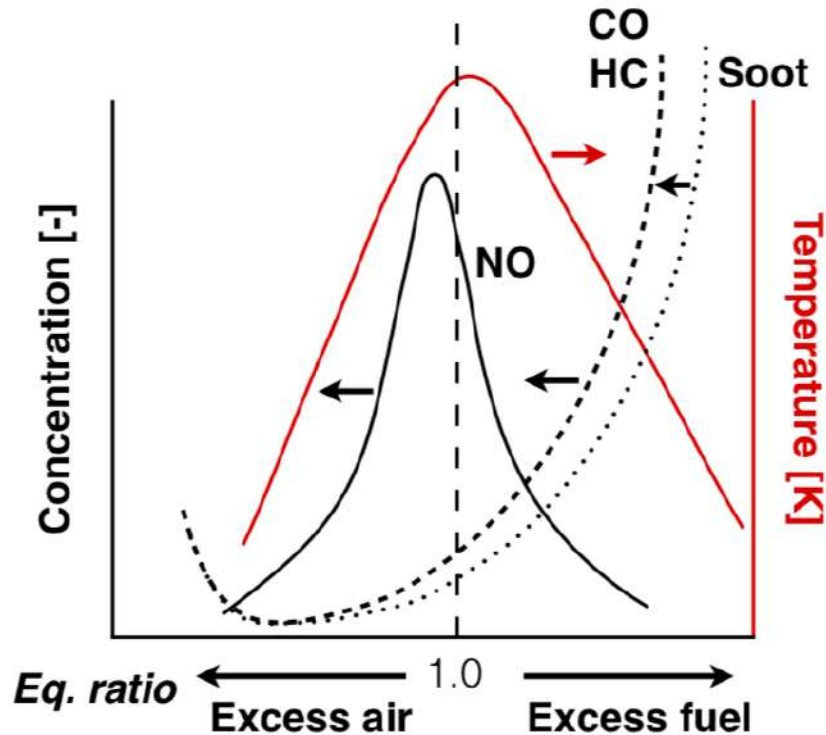


FIGURE 1.7 – Evolution typique de la production de polluants et de la température en fonction de l’excès d’air. La figure est tirée de Felden (2017).

tailles de gouttes générée est notamment un élément clé. En effet, puisqu’une goutte de grande taille nécessite un temps plus grand pour s’évaporer qu’une petite, la distribution de tailles de gouttes impacte directement la répartition du carburant et, par conséquent, la structure de la flamme, le régime de combustion et la formation des polluants. L’étude des injecteurs et la compréhension fine des différents phénomènes physiques en jeu dans la génération du spray se positionne donc comme un sujet de recherche de première importance pour permettre le fonctionnement et l’optimisation de chambre de combustion en régime pauvre.

1.4 Les injecteurs Airblast

Originellement proposés par Lefebvre & Miller (1966), les injecteurs de type Airblast suscitent un intérêt grandissant chez les motoristes pour leur très bonne qualité d’atomisation dans une large gamme de conditions de fonctionnement. Le spray généré par ce type d’injecteur est, en effet, constitué de très fines gouttes ce qui permet un bon mélange entre le carburant et l’air ainsi qu’une évaporation rapide du liquide favorisant la stabilité de la flamme en combustion pauvre et la diminution de la production de polluants.

Dans sa revue sur la technologie d’injecteur de type Airblast, Lefebvre (1980) distingue deux familles. La première est constituée des injecteurs à jet simple, dont un schéma est disponible en Figure 1.8a. Le liquide est injecté sous la forme d’un jet placé au milieu d’un écoulement gazeux à très haute vitesse. Le jet se fragmente alors en gouttes sous l’effet du fort cisaillement aérodynamique. La seconde famille est la technologie des injecteurs Airblast avec préfilm.

Le carburant est introduit de façon à former un film liquide mince qui ruisselle ensuite jusqu'au bout de la lèvre du préfilmeur, où il est enfin atomisé en fines gouttelettes sous l'effet du cisaillement aérodynamique. Un schéma de principe de ce type d'injecteur est donné en Figure 1.8b. Bien que les performances d'atomisation de ces deux familles d'injecteur Airblast soient très bonnes, Lefebvre (1980) souligne la supériorité de la technologie avec préfilmeur qui est capable de fournir un spray de meilleure qualité même dans des conditions défavorables, comme lorsque le rapport de vitesses entre l'air et le liquide est faible. Cette dernière technologie est donc largement privilégiée dans les applications aéronautiques et fait l'objet des travaux de cette thèse.

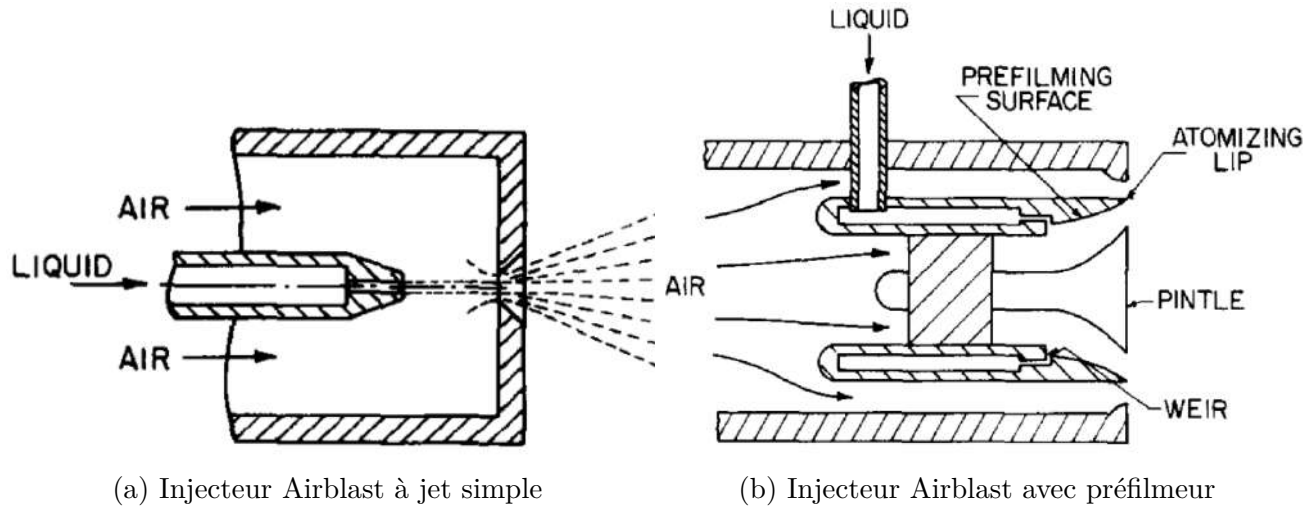


FIGURE 1.8 – Schéma présentant les deux familles d'injecteurs de type Airblast : injecteur à jet simple ("plain jet Airblast atomizer") et un injecteur avec préfilmeur ("prefilming Airblast atomizer"). Les figures sont issues de Lefebvre (1980).

L'identification des paramètres physiques qui influencent la distribution de tailles de gouttes dans les injecteurs Airblast avec préfilmeur a donné lieu à un nombre conséquent d'études expérimentales. Il a ainsi été observé que l'augmentation de la vitesse de l'air (Lefebvre 1980, Jasuja 1981, Sattelmayer & Wittig 1986, Aigner & Wittig 1988, Beck et al. 1991, Bhayaraju & Hassa 2009) et/ou de la pression (Lefebvre 1980, Jasuja 1981, Bhayaraju & Hassa 2009) tend à faire diminuer la taille des gouttes. Comme récemment suggéré par Chaussonnet et al. (2020) et Brend et al. (2020), l'effet de la pression et de la vitesse de l'air peut en réalité être plus généralement attribué à une augmentation des forces aérodynamiques qui s'exercent sur le liquide. A l'inverse, l'utilisation d'un liquide avec un coefficient de tension de surface plus élevé produit des gouttes plus grosses, du fait de la résistance des forces interfaciales à la fragmentation du liquide. La viscosité du liquide a un impact limité sur la taille des gouttes dans le spray dans la gamme de viscosité des carburants classiquement utilisés dans les moteurs aéronautiques. L'influence de la hauteur du film liquide est, quant à elle, toujours sujet à discussion. D'un côté, certains auteurs, comme El-Shanawany & Lefebvre (1980), Rizk & Lefebvre (1983) ou Déjean et al. (2016), observent que l'augmentation de l'épaisseur du film liquide conduit à des gouttes plus grosses. Tandis que d'un autre côté, Sattelmayer & Wittig (1986), Aigner & Wittig (1988), Gepperth et al. (2013), Shanmugas et al. (2018) montrent que la distribution de tailles de gouttes est décorrélée de la hauteur de film. Les observations reportées dans la littérature sur le processus d'atomisation au niveau de la lèvre

du préfilmeur diffèrent également beaucoup. Pour les auteurs observant une influence de la hauteur de film liquide sur la distribution de tailles de gouttes, le processus d'atomisation est assimilé à la désintégration d'une nappe liquide : le liquide se propage en aval de la lèvre du préfilmeur en formant une nappe qui est ensuite fragmentée par l'écoulement d'air. D'autres auteurs, notamment Bhayaraju & Hassa (2009) et plus tard Gepperth et al. (2012), observent que le liquide s'accumule au niveau de la lèvre du préfilmeur avant d'être atomisé ce qui décorrèle la dynamique du film liquide du processus d'atomisation. La différence entre les régimes d'atomisation par accumulation et d'atomisation par formation d'une nappe liquide a été étudiée par Déjean et al. (2016). Ils ont observé que la transition entre ces deux régimes est pilotée par le débit dans le film liquide, et que le développement des vagues d'instabilité à sa surface joue un rôle important. Ces observations sont également en accord avec les conclusions réalisées par Sadeghizadeh & Drallmeier (2018, 2019). En étudiant l'atomisation du liquide au bout d'une marche, ces derniers établissent que la transition d'un régime de fragmentation par accumulation à un régime d'atomisation de nappe est liée à la fois à la présence d'instabilités d'interface de large amplitude et à l'inertie du film liquide. Ces conclusions ont récemment été appuyée par Brend et al. (2020) qui précisent que le comportement du film liquide au niveau du bord d'atomisation est déterminé par une compétition entre l'énergie cinétique contenue dans les vagues à la surface du film et la force de tension de surface. Ils proposent de caractériser la régime d'atomisation par un nombre de Weber We_p basé sur la hauteur du film liquide h_f , la masse volumique du liquide ρ_l , le coefficient de tension de surface du liquide σ et la vitesse convective des vagues à la surface du film $u_{l,c}$:

$$We_p = \frac{\rho_l h_f u_{l,c}^2}{\sigma \sin(\beta)} \quad (1.1)$$

où β correspond à l'angle entre la surface du préfilmeur et le rebord de sa lèvre. Brend et al. (2020) indiquent que lorsque l'inertie (i.e. l'énergie cinétique) des vagues à la surface du film, et donc We_p , est faible, la force de tension de surface permet au liquide de rester attaché à la surface du préfilmeur et conduit à une accumulation au niveau du bord avant l'atomisation. A l'inverse, lorsque l'inertie des vagues à la surface du film augmente, la force de tension de surface n'est plus suffisamment forte pour garder le liquide attaché au niveau du bord et, le film continue sa course en aval du préfilmeur en formant une nappe liquide.

1.5 Les phénomènes diphasiques en jeu pour la création du spray

La génération d'un spray de carburant par un injecteur de type Airblast avec préfilmeur peut se décomposer en un enchaînement de phénomènes physiques complexes. La Figure 1.9 fournit une représentation schématique des principales transformations subies par le carburant entre le moment où il est délivré à l'injecteur et sa combustion. Ces transformations sont les suivantes :

- **Injection** : Le carburant est administré dans l'injecteur de façon à former un film liquide. Une première solution consiste à l'injecter directement via un canal qui débouche le long du préfilmeur de manière à ce qu'un film se forme juste après l'injection. Une seconde solution également largement répandue est d'utiliser un injecteur *pressure swirl*

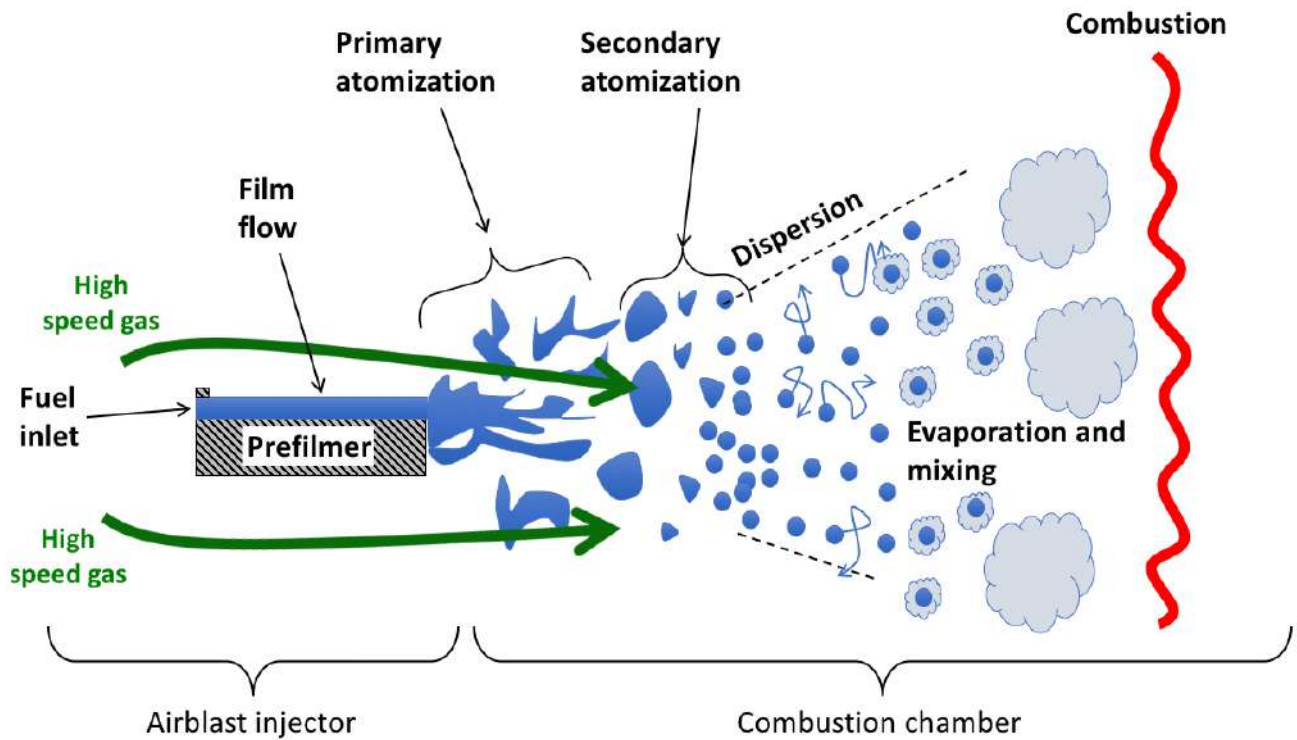


FIGURE 1.9 – Décomposition des phénomènes physiques subis par le carburant entre son entrée dans un injecteur Airblast jusqu'à sa combustion dans la chambre. La figure est adaptée de Chaussonnet (2014).

en amont pour créer un spray primaire dont les gouttes viennent impacter le préfilmeur et former un film liquide. L'emploi de cette deuxième solution fait intervenir des phénomènes d'interaction spray/paroi avec de possibles ré-émissions de gouttes après impact ("splashing").

- **Ecoulement de film :** Le film formé s'écoule le long du préfilmeur grâce au transfert de quantité de mouvement de l'écoulement d'air à haute vitesse vers le liquide. Le fort cisaillement du gaz sur la surface du film engendre également la naissance de vagues d'instabilité qui se développent ensuite dans les directions axiale et transverse de l'écoulement. Ces instabilités peuvent dans certains cas conduire à un arrachement de liquide de la surface du film. Ce phénomène, appelé "stripping", n'est cependant observé que lorsque la hauteur du film est élevée et/ou la vitesse du liquide est grande ce qui est rarement le cas dans les injecteurs Airblast.
- **Atomisation primaire :** Lorsque le film liquide arrive au niveau du bord du préfilmeur, il se retrouve plongé dans l'écoulement d'air à haute vitesse et subit un processus de fragmentation, appelé atomisation primaire, sous l'effet des forces aérodynamiques. Comme évoqué dans la partie 1.4, deux régimes d'atomisation primaire existent en fonction de l'inertie du film et des vagues d'instabilités qui évoluent à sa surface. Lorsque son inertie est forte, le film liquide continue sa trajectoire et forme une nappe liquide qui se propage dans la chambre de combustion. Cette nappe est déstabilisée par le cisail-

ment de l'écoulement gazeux et finit par se fragmenter en formant différentes structures qui se désintègrent ensuite en gouttes. A l'inverse, lorsque l'inertie est faible, le liquide s'accumule au niveau du bord du préfilm puis, finit par être accéléré par l'écoulement gazeux avant de se détacher de la zone d'accumulation et de former des gouttes. Ce dernier processus d'atomisation primaire est l'objet d'une part importante des travaux de cette thèse. Il est étudié en profondeur dans le chapitre 2 puis, modélisé dans le chapitre 3.

- **Atomisation secondaire** : Les gouttes produites par l'atomisation primaire étant généralement de grande taille, elles sont fortement sensibles aux forces aérodynamiques générées par l'écoulement d'air à haute vitesse. Ceci a pour conséquence de déformer les gouttes qui finissent par se fragmenter en un ensemble de plus petites gouttes. Ce processus, appelé atomisation secondaire, peut être subi par une goutte tant que celle-ci ne possède pas une taille suffisamment petite pour que les forces stabilisatrices liés à la tension de surface soit plus fortes que les forces aérodynamiques.
- **Dispersion** : Les gouttes du spray formées à l'issue des étapes d'atomisation sont ensuite dispersées dans la chambre de combustion grâce à l'effet d'entraînement créé par l'écoulement gazeux. Les gouttes de plus faible diamètre sont alors fortement affectées par l'écoulement gazeux. Elles se comportent comme des traceurs dans l'écoulement et leur trajectoire suit celle du gaz. Lorsque la taille des gouttes est plus grande, leur inertie augmente et elles sont de moins en moins affectées par l'écoulement gazeux. La disparité des trajectoires de gouttes ainsi créée a pour conséquence de disperser spatialement le spray. Cette dispersion est également accentuée par l'écartement naturel des gouttes du spray engendrée par son angle d'ouverture. La concentration local des gouttes diminue donc et, le spray se transforme en un nuage de gouttes diluées dans l'écoulement gazeux.
- **Evaporation et mélange** : Lors de l'approche de la flamme, la température des gouttes augmente jusqu'à dépasser la température de saturation du carburant. Elles commencent alors à s'évaporer selon un processus souvent modélisé par l'évaporation d'une goutte isolée en raison du caractère dilué du spray. Des modélisations de ce phénomène sont, par exemple, disponibles dans les travaux de Spalding (1953) ou Abramzon & Sirignano (1989). La vapeur de carburant produite se mélange ensuite à l'air sous l'action de la turbulence créant un mélange air/carburant qui doit être le plus homogène possible pour assurer une bonne qualité de combustion.
- **Combustion** : Le mélange air/carburant est, finalement, brûlé dans une flamme. Il convient, toutefois, de remarquer que ce régime de combustion est un régime idéal. Il suppose que les gouttes se soient intégralement évaporées et, que la vapeur de carburant ait eu le temps de parfaitement se mélanger à l'air avant d'atteindre la flamme. Or, l'existence de grosses gouttes dans le spray ainsi que, de zone de fortes concentrations locales de liquide, compromettent bien souvent ces deux hypothèses. Certaines gouttes atteignent alors le front de flamme et sont brûlées en formant des flammes de diffusion ce qui augmente la formation de polluants et les risques d'imbrûlés. Les différents régimes de combustion de spray possibles ont notamment été étudiés par Reveillon & Vervisch (2005) et, le lecteur intéressé pourra se référer à ces travaux s'il souhaite de plus amples détails. Dans le but de réduire la production de polluants et d'imbrûlés, il est souhai-

table de diminuer au maximum les phénomènes de combustion par flammes de diffusion. L'injecteur est ici d'une importance capitale. Il doit, en effet, former un spray dont la taille des gouttes est la plus petite possible puis, disperser les gouttes de façon homogène pour assurer à la fois une évaporation rapide du liquide et un bon mélange du carburant avec l'air avant d'atteindre la flamme.

Cette thèse s'intéressant à la formation du spray, les phénomènes d'écoulement de film ainsi que, d'atomisation primaire et secondaire sont maintenant brièvement discutés.

1.5.1 L'écoulement du film liquide

Les différents types de films

Au sens général, un film est une fine couche d'un matériau donné qui sépare l'interface entre deux autres matériaux. Il existe deux catégories de films : les films statiques et les films dynamiques. Les premiers sont faits d'un matériau solide. Ils sont notamment très utilisés dans de nombreux domaines de l'industrie comme, par exemple, ceux de l'électronique (circuits imprimés), de l'automobile (peintures) ou encore de l'alimentaire (conservateurs). Les seconds sont constitués d'une fine couche de liquide ou de gaz qui s'écoule. Ils apparaissent dans un grand nombre de domaines scientifiques et dans un large éventail d'échelles allant de l'échelle nanoscopique à continentale. Parmi ces domaines, on retrouve par exemple : la géophysique (écoulement de lave et dynamique des glaciers), la biophysique (nanofluidique et microfluidique) ou encore l'ingénierie mécanique (injection de carburant et lubrification). Dans le domaine aéronautique, ce type de film est principalement utilisé pour trois types d'applications :

- Protéger les parois des chambres de combustion avec un film d'air ;
- Lubrifier les pièces mobiles avec un film d'huile ;
- Atomiser le carburant dans la chambre dans les injecteurs de type Airblast avec préfil-meur.

La grande diversité des applications et des échelles peut conduire l'écoulement d'un film à avoir des origines et des dynamiques très variées. Le revue de Craster & Matar (2009) permet de classer les différents familles de films dynamiques de la façon suivante :

- **Les films pilotés par des forces volumiques :** Le mouvement du film est généré par l'action d'une force volumique sur le film. Cette famille inclue, par exemple, les films qui s'écoulent par gravité, les films pilotés par une force centrifuge ou encore, les films chargés électriquement et mis en mouvement par une force électromagnétique.
- **Les films pilotés par des effets thermiques :** Le champs de température conduit à une in-homogénéité de la force de tension de surface au niveau de l'interface. La présence d'un gradient de tension de surface génère une force tangentielle qui conduit le film à s'écouler des régions de basses tensions de surface vers les régions de hautes tensions de surface (effet de Marangoni).
- **Les films pilotés par des tensioactifs :** Comme pour les films pilotés par des effets thermiques, le mouvement du film est généré par un effet de Marangoni. Le gradient de tension de surface est cependant créé à l'aide de tensioactifs. Ces derniers sont des éléments qui permettent de réduire la force de tension de surface. Le gradient de tension de surface est alors lié à la concentration locale de tensioactif à la surface du film. La pulvérisation de tensioactif sur un film est un procédé qui trouve de nombreuses applications dans l'industrie et la biologie comme, pour le séchage de semi-conducteurs, l'enrobage d'une surface ou plus généralement pour les écoulements micro-fluidiques.

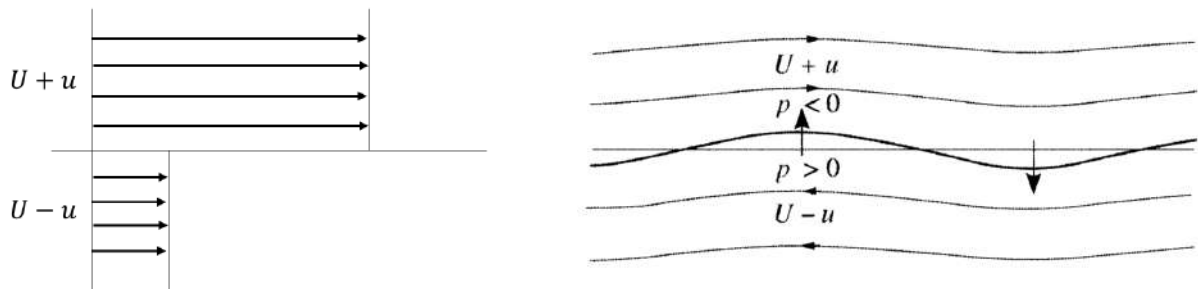
- **Les films pilotés par les forces intermoléculaires :** Dans les situations où la hauteur du film liquide est inférieure à $0.1 \mu\text{m}$, les forces intermoléculaires influencent la dynamique du film et peuvent conduire à la rupture du film et au démoillage de la surface. Ce processus est de première importance dans les applications industrielles consistant à recouvrir une surface d'une fine couche d'un matériau. Il nécessite ici d'être contrôlé pour éviter des démoillages locaux de la surface et assurer un dépôt homogène du matériau.
- **Les films pilotés par cisaillement d'interface :** Un écoulement gazeux à haute vitesse est placé au-dessus du film cisaille son interface. Ceci engendre un transfert de quantité de mouvement vers le film qui se met en mouvement. Cette dernière catégorie d'écoulement de film est principalement utilisée dans les applications aéronautiques où elle constitue notamment un élément clé du fonctionnement des injecteurs de type Airblast.

La complexité des phénomènes physiques en jeu fait que chaque famille de films énoncée constitue un sujet de recherche à part entière. Comme évoqué précédemment, dans les injecteurs de type Airblast, le film liquide est piloté par le cisaillement d'interface. Seule cette famille sera donc considérée dans la suite. Cependant, le lecteur intéressé pourra se référer à la revue de Craster & Matar (2009) pour plus d'information sur les autres familles de films. La partie suivante traite de la dynamique d'un film liquide cisailé.

Dynamique d'un film liquide cisailé par un écoulement à haute vitesse

La dynamique des films liquides présents dans les injecteurs de type Airblast est dictée par le cisaillement de l'écoulement gazeux au niveau de sa surface. Celui-ci est en effet à l'origine de la naissance d'instabilités hydrodynamiques assimilables à des instabilités de Kelvin-Helmholtz.

Ce type d'instabilité fut originellement décrit par Von Helmholtz (1868) puis, formalisé mathématiquement par Kelvin (1871). Elle se produit au niveau de la surface de contact entre deux fluides co-courants qui se déplacent à des vitesses différentes (Figure 1.10a). L'arrivée d'une pe-



(a) Discontinuité initiale de vitesse à la surface de contact (b) Evolution de la surface de contact (Charru 2007)

FIGURE 1.10 – Illustration du développement de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz au niveau de la surface de contact entre deux fluides co-courants

tite perturbation au niveau de l'interface génère un mouvement oscillatoire (Figure 1.10b). La conservation de l'énergie totale impose alors une dépression dans les zones d'accélération et une surpression dans les zones de décélération ce qui amplifie la déformation de l'interface et entretient l'oscillation. Dans le cas de deux fluides monophasiques, les modifications locales du cisaillement créées par la déformation de l'interface aboutissent in fine à la formation de

rouleaux. Ces structures, typiques de ce genre d'instabilité, sont illustrées en Figure 1.11. Dans

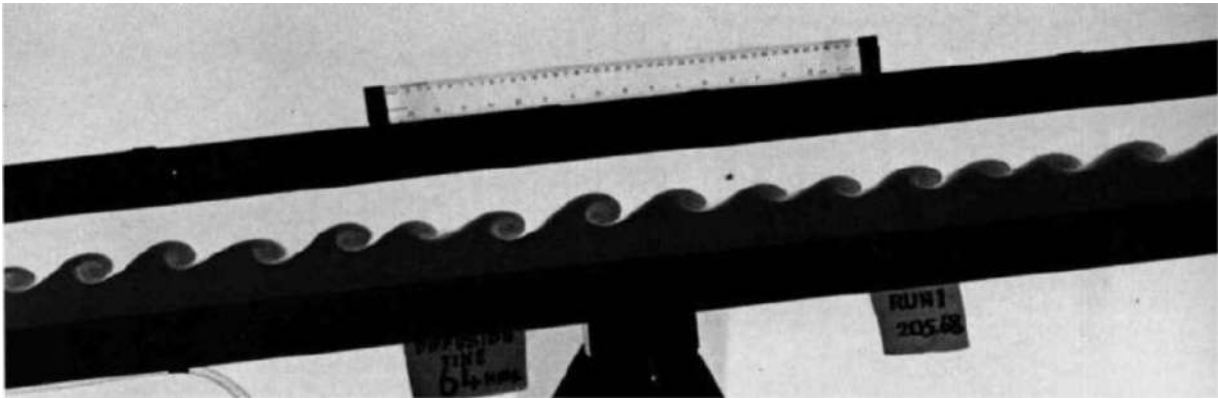


FIGURE 1.11 – Développement d'une instabilité de Kelvin-Helmholtz dans l'expérience de Thorpe (1969). La photo est tirée de Van Dyke (1982).

le cas d'un écoulement diphasique, la surface de contact entre les deux fluides n'est plus une simple couche de cisaillement mais une interface. Si le mécanisme global de l'instabilité n'est pas modifié, son développement est, quant à lui, affecté par la présence d'une force de tension de surface ainsi que par l'existence de discontinuités de masse volumique et de viscosité. Ainsi, Kelvin (1871) montre, par exemple, à l'aide d'une étude mathématique de stabilité linéaire intégrant également la gravité, que la force de tension de surface agit comme une force stabilisatrice pour l'interface. Le cisaillement généré par l'écoulement gazeux doit alors être supérieur à un certain seuil pour que l'interface devienne instable. Certains auteurs, comme Raynal (1997) et Matas et al. (2011), ont par la suite affiné la description mathématique de l'instabilité en considérant un raccord des vitesses au niveau de l'interface et un profil plus réaliste. Ces travaux ont mis en lumière le rôle important joué par l'épaisseur du profil (également appelée épaisseur de vortacité δ_g) dans la fréquence et l'amplification de cette instabilité. Bien que les travaux expérimentaux de Ben Rayana (2007) suggèrent que l'instabilité de Kelvin-Helmholtz, dont la nature est non-visqueuse, domine la formation des vagues initiales sur le film, d'autres auteurs, comme Yecko et al. (2002) ou Boeck & Zaleski (2005), ont montré, sur la base d'une analyse de stabilité, que l'existence d'une discontinuité de viscosité au niveau de l'interface conduit à l'apparition d'instabilités d'origine visqueuse pouvant participer à l'amplification d'une déformation. Selon ces auteurs, les deux mécanismes principaux sont le "H-mode" de Hooper & Boyd (1983) et Hinch (1984) et le mécanisme de Tollmien-Schlichting (Schlichting 1955). Même s'il est probable que ces mécanismes jouent un rôle dans la formation des vagues d'instabilité sur le film liquide, son fort cisaillement dans un injecteur de type Airblast permet aux mécanismes non-visqueux de Kelvin-Helmholtz de commander la création des instabilités dominantes. Les mécanismes visqueux ne sont donc pas décrits dans cette thèse mais, le lecteur en trouvera une description détaillée dans les travaux cités ci-dessus.

Si la naissance des instabilités ainsi que leur amplification pour former des vagues peuvent être mathématiquement caractérisées, la complexité des phénomènes physiques et la nature tridimensionnelle de l'écoulement du film rendent la prédiction de l'évolution des vagues très difficile. En effet, comme le montre la photo en Figure 1.12 issue des travaux expérimentaux de Gosselin et al. (2017), les vagues 2D produites initialement peuvent ensuite se déstabiliser pour former des vagues 3D. La dynamique du film devient alors très perturbée et n'est plus

caractérisée par une instabilité dominante.

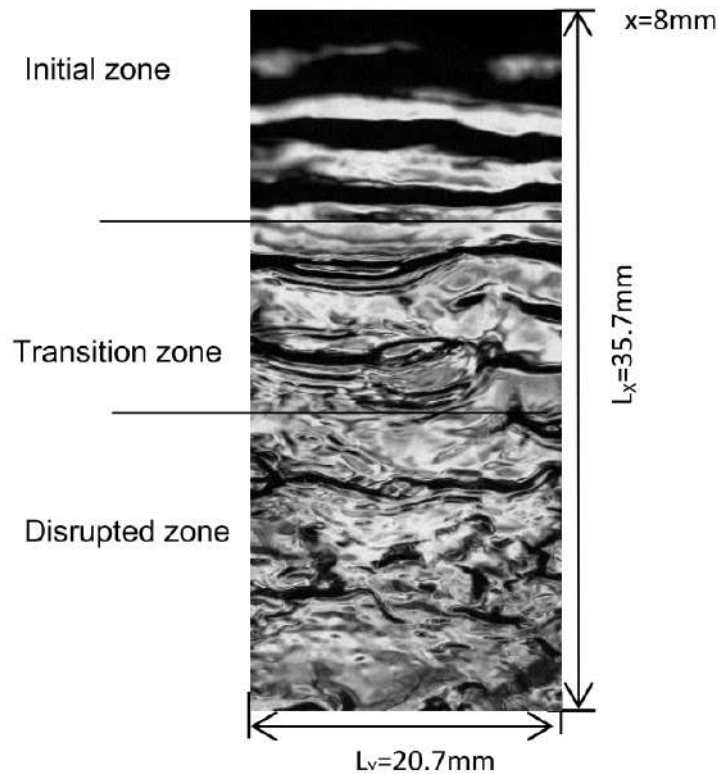


FIGURE 1.12 – Visualisation instantanée de l'évolution spatiale des instabilités sur un film liquide d'eau cisailé par un écoulement gazeux à haute vitesse. L'image est issue des observations expérimentales de Gosselin et al. (2017).

La dynamique des films liquides pleinement développés a notamment été étudiée par Peng et al. (1991). A partir d'observations expérimentales réalisées sur une large gamme de points de fonctionnement et en utilisant des liquides de viscosités différentes, les auteurs ont proposé une cartographie des régimes en fonction de nombres de Reynolds gazeux R_g et liquide R_l . Cette dernière est donnée pour deux liquides en Figure 1.13. Même si les différents régimes identifiés ainsi que la hiérarchie des transitions autres eux ne sont pas modifiés, le changement de la viscosité du liquide a un impact marqué sur la carte des régimes. Ceci suggère que, comme le notent les auteurs, soit il manque un nombre sans dimension en plus des nombres de Reynolds de l'écoulement gazeux et du film pour prédire la dynamique du film ; soit ces nombres ne sont tout simplement pas appropriés pour la décrire. Il faut cependant remarquer que, à la connaissance de l'auteur, il n'existe toujours pas de consensus scientifique autour des nombres sans dimension qui régissent la dynamique des films liquides cisailés. Les différents auteurs semblent cependant s'accorder sur l'importance du rapport des vitesses et des masses volumiques.

Quoiqu'il en soit, même si les conditions d'apparition des différents régimes ne sont pour l'heure pas totalement connues, l'étude de Peng et al. (1991) permet de les classer de la façon suivante :

- **Flat film** : Seules quelques petites perturbations apparaissent à la surface du film liquide mais elles ne s'amplifient pas et aucun évènement périodique n'est clairement visible.

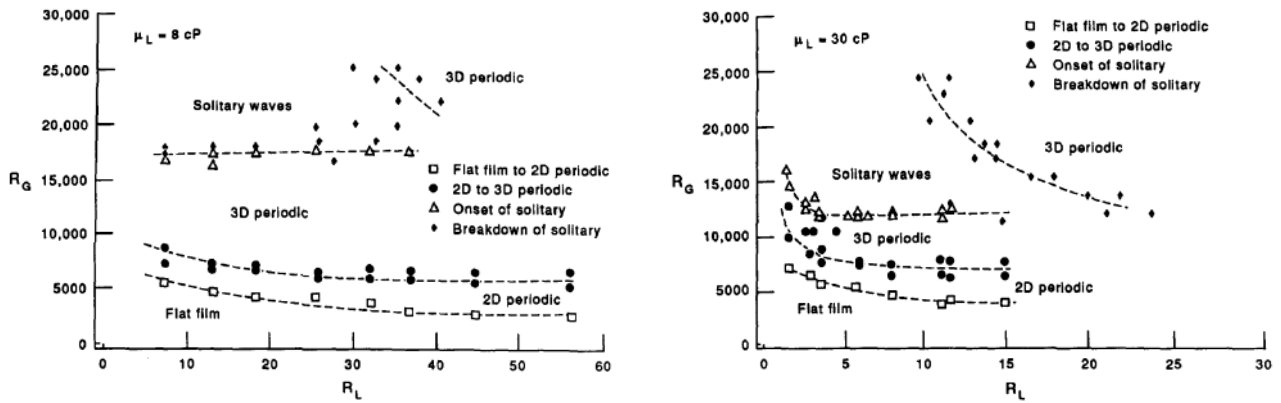


FIGURE 1.13 – Cartographies des régimes de dynamique de film proposée par Peng et al. (1991) pour deux liquides de viscosités différentes (1 cP correspond à 10^{-3} Pa.s).

- **2D periodic** : Des vagues d'instabilités 2D se développent à la surface du film et sont convectées dans la direction de l'écoulement. Leur amplitude est faible et leur fréquence d'apparition se fait à intervalle régulier.
- **3D periodic** : Lorsque l'amplitude des vagues d'instabilités 2D périodiques augmente, leur crête est déstabilisée par l'écoulement gazeux conduisant à l'apparition d'instabilités de faibles amplitudes dans la direction transverse de l'écoulement.
- **Solitary waves** : L'augmentation du cisaillement de l'interface engendre l'amplification toujours plus importante des vagues d'instabilités. Lorsque leur amplitude devient suffisamment importante (typiquement de l'ordre de grandeur de la hauteur de film selon Peng et al. (1991)), la déstabilisation de la crête des vagues par l'écoulement gazeux est telle qu'elle conduit à la formation de vagues 3D asymétriques et irrégulières. Ces vagues se caractérisent par un front continu et très accentué ainsi qu'une largeur étroite. Du fait de leurs grandes amplitudes, les "solitary waves" transportent une quantité importante de liquide. Leur vitesse étant également plus rapide que celle de la base du film, elles modifient en profondeur l'écoulement du film et réduisent sa hauteur moyenne (Peng et al. 1991).
- **Roll waves** : Ces vagues d'instabilités sont de même nature que les "solitary waves". Cependant, les forces aérodynamiques qui s'exercent sur la crête des vagues sont si importantes qu'une instabilité de Rayleigh-Taylor s'y développe aboutissant ensuite à la formation de ligaments. Ces derniers finissent par se fragmenter en gouttes selon un processus d'atomisation de Rayleigh-Plateau (Lord Rayleigh 1878). La Figure 1.14 illustre schématiquement ces différentes étapes. Il peut être remarqué que la dynamique des roll waves est très proche de celle observée par Marmottant & Villermaux (2004) lors de l'atomisation d'un jet coaxial par un écoulement co-courant. Pour finir, il convient de noter que le processus d'arrachement de goutte de la surface du film liquide est également connu dans la littérature sous le nom de phénomène de "film stripping".

La Figure 1.15 illustre les régimes "Flat film", "3D periodic" et "Solitary waves" observés par Hashmi & Klingsporn (2011) lors du cisaillement d'un film d'huile par un écoulement gazeux co-courant à différentes vitesses.

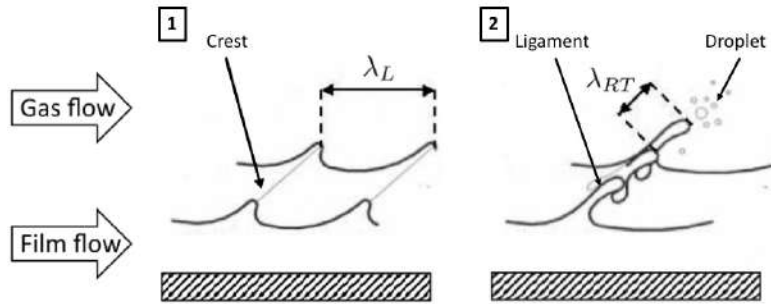


FIGURE 1.14 – Illustration schématique de la dynamique des "roll waves" sur un film liquide.

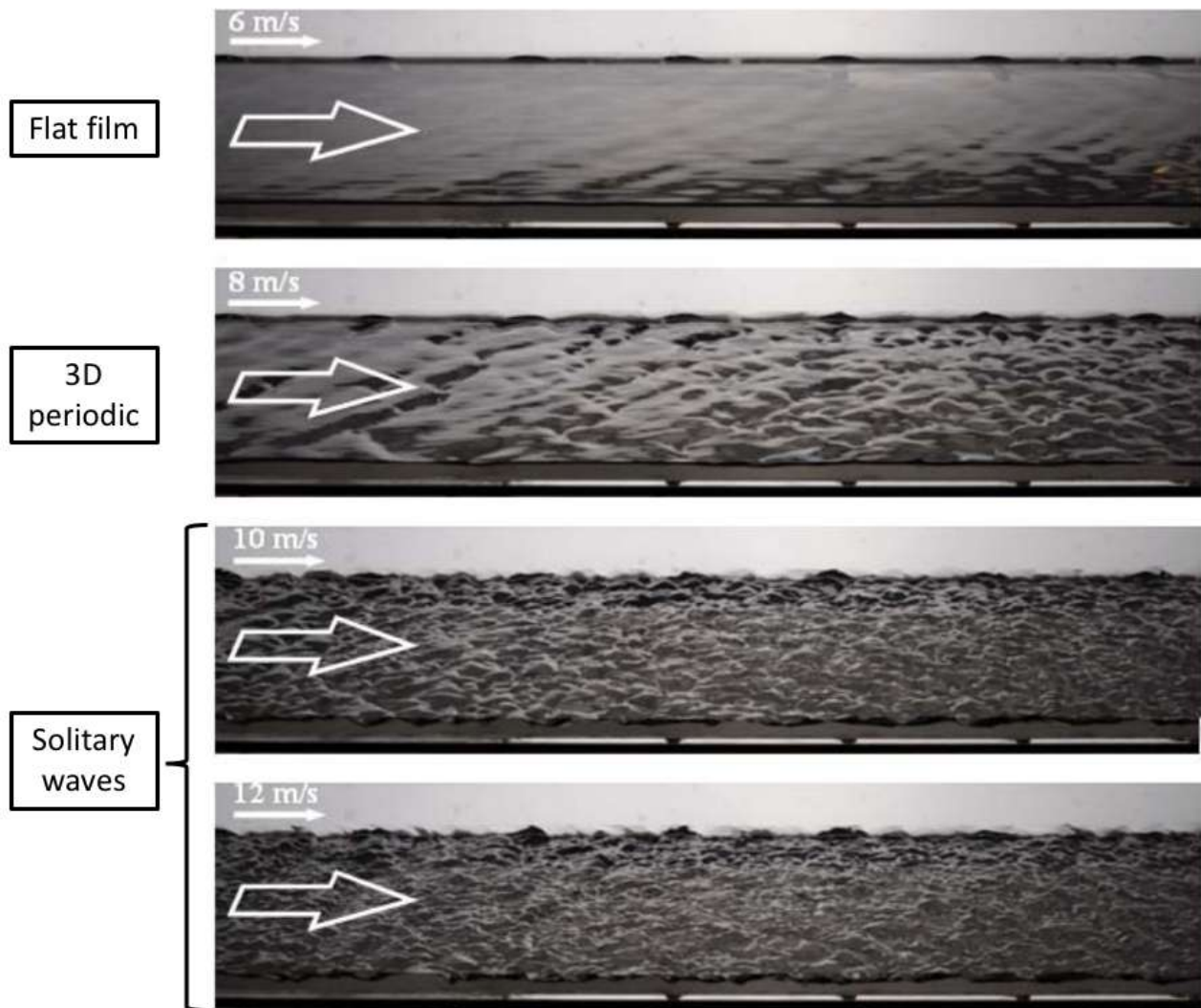


FIGURE 1.15 – Vagues d'instabilités formées sur un film liquide d'huile établi pour différentes vitesses de cisaillement d'un écoulement gazeux co-courant. L'image est tiré des observations expérimentales de Hashmi & Klingsporn (2011).

1.5.2 L'atomisation primaire

Comme expliqué dans la partie 1.4, il existe deux processus d'atomisation primaire pour atomiser le carburant dans les injecteurs de type Airblast avec préfilmneur. En effet, lorsque le film liquide arrive au niveau de la lèvre du préfilmneur, il peut, s'il dispose d'une inertie suffisamment importante, former une nappe liquide qui est ensuite atomisée. Dans le cas contraire, il s'accumule sur la lèvre du préfilmneur avant d'être entraîné par l'écoulement et être atomisé. Cette partie introduit quelques caractéristiques importantes de ces deux types d'atomisation.

Atomisation primaire d'une nappe liquide

La dynamique d'une nappe liquide cisailée de part et d'autre par un écoulement gazeux à haute vitesse a fait l'objet d'études académiques permettant de comprendre et de caractériser les mécanismes en jeu lors de son atomisation primaire. Les configurations étudiées sont souvent planes pour faciliter la réalisation de mesures expérimentales et la composante tournante de l'écoulement gazeux présente dans la plupart des configurations d'injecteur est négligée. Le préfilmneur n'est également pas modélisé et le liquide est directement injecté sous la forme d'une nappe. Ceci signifie que les instabilités liées à l'écoulement du film liquide et donc, initialement présentes à la surface de la nappe liquide, ne sont pas prises en compte. Même si les configurations académiques semblent capables de décrire qualitativement l'atomisation d'une nappe liquide, il faut garder à l'esprit que l'existence de ces instabilités a des conséquences sur le mode de déstabilisation de la nappe liquide dans les configurations d'injecteur (Gosselin et al. 2017). La Figure 1.16 présente une configuration académique typiquement étudiée ainsi qu'un exemple de nappe liquide créé par ce type de dispositif.

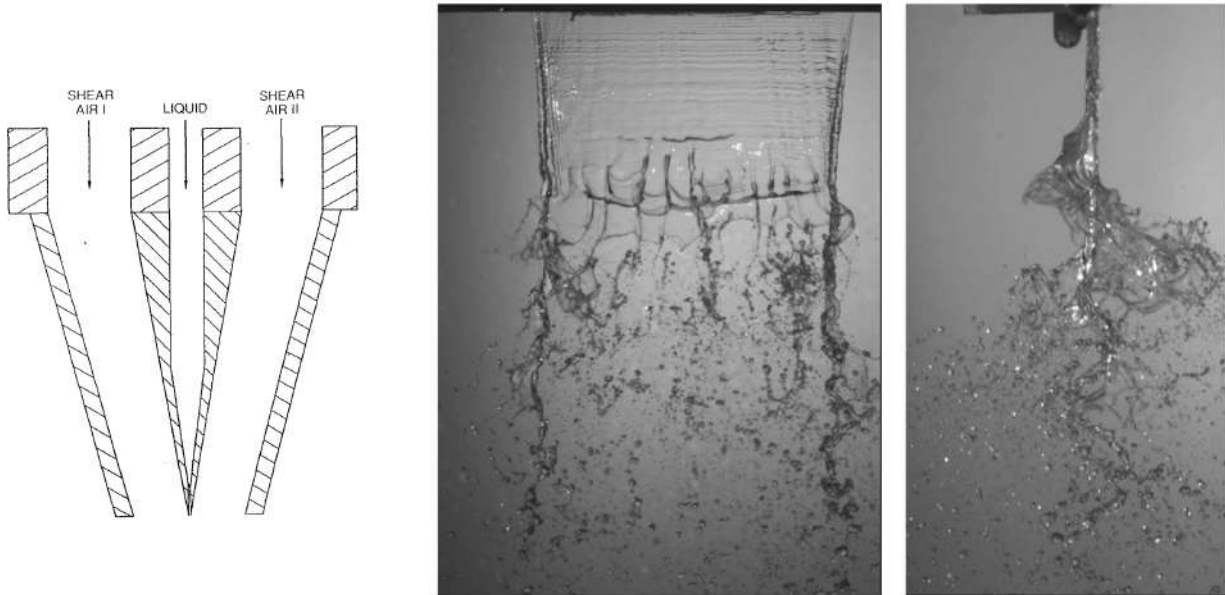


FIGURE 1.16 – Configuration académique typiquement utilisée pour étudier la déstabilisation de nappe liquide (issue de Stapper et al. (1990)), à gauche, et, vues de face et de profil, tirée de Larricq-Fourcade (2006), de l'atomisation d'une nappe liquide typiquement obtenue.

L'observation des régimes de rupture de nappe a débuté dans les années 1990 avec les travaux de Mansour & Chigier (1990) et Stapper et al. (1990) qui identifient deux régimes de

ruptures en fonction du rapport des vitesses entre l'écoulement gazeux et la nappe liquide : le "cellular breakup" pour les faibles rapports et le "stretched-ligament breakup" pour les forts rapports. Stapper et al. (1990) expliquent l'existence de ces deux régimes par une concurrence entre des instabilités longitudinales et transversales qui se forment, sous l'effet du cisaillement, à la surface de la nappe. A faible rapport de vitesses, l'amplitude des instabilités longitudinales et transversales croient de la même façon ce qui aboutit à la fragmentation de la nappe en un ensemble de structures cellulaires : "cellular breakup". Lorsque le rapport de vitesses augmente, les instabilités longitudinales prennent le pas sur les instabilités transversales ce qui conduit à la formation de ligaments orientés perpendiculairement à l'écoulement : "stretched-ligament breakup". Les régimes "cellular breakup" et "stretched-ligament breakup" sont illustrés dans la Figure 1.17.

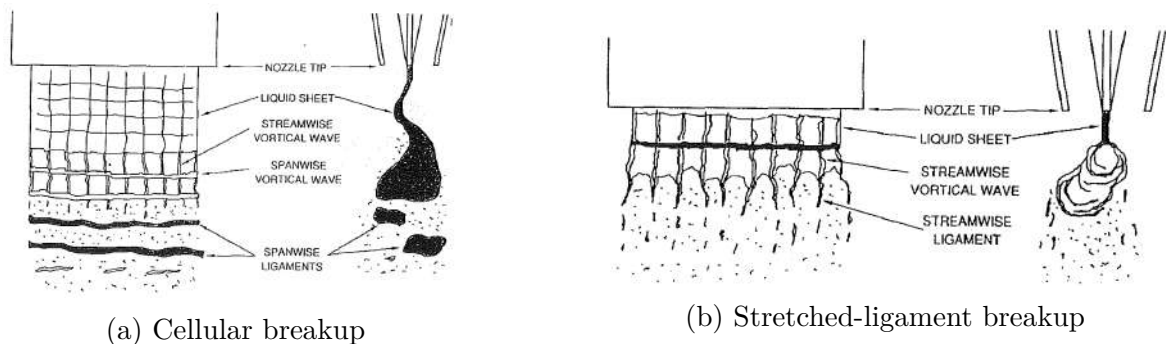


FIGURE 1.17 – Illustration schématique des régimes d'atomisation de nappe liquide "cellular breakup" et "stretched-ligament breakup" décrit par Stapper et al. (1990).

Ces deux régimes ont par la suite été étudiés plus en profondeur par Park & Huh (2004) et Lozano et al. (2005). Sur la base d'observations expérimentales, ces derniers auteurs ont proposé une classification des régimes en fonction du rapport des quantités de mouvement MR qui, outre les masses volumiques et les vitesses, fait intervenir l'épaisseur de la nappe h_l ainsi qu'une longueur caractéristique de l'écoulement gazeux h_g (la hauteur du canal dans Lozano et al. (2005)) :

$$MR = \frac{\rho_g U_g^2 h_g}{\rho_l U_l^2 h_l} \quad (1.2)$$

Cependant, Fernandez et al. (2009) ont, plus récemment, indiqué que la dépendance au rapport de longueurs h_g/h_l n'est pas nécessaire, et que le flux de quantité de mouvement M suffit, pour décrire le comportement d'atomisation d'une nappe liquide :

$$M = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2} \quad (1.3)$$

Pour valider cette affirmation, Fernandez et al. (2009) ont conduit une vaste campagne expérimentale où ils ont caractérisé le régime d'atomisation en faisant varier non seulement la vitesse des écoulements mais aussi la pression. Celle-ci leur a, également, permis de montrer l'existence de deux autres régimes, appelés "Torn-sheet breakup" et "Membrane-sheet breakup", qui apparaissent pour des rapports de flux de quantité de mouvement M élevés. La classification des régimes établie par Fernandez et al. (2009) en fonction de M est donnée en Figure 1.18. Elle est détaillée ci-dessous :

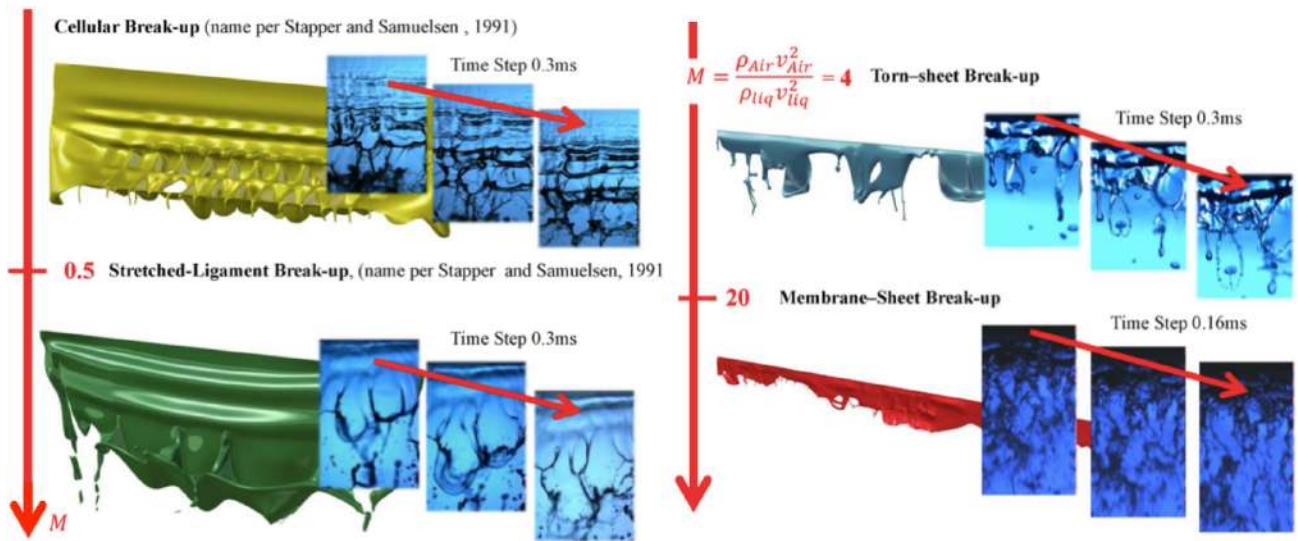


FIGURE 1.18 – Classification des mécanismes d’atomisation primaire de nappe liquide en fonction du rapport de quantité de mouvement $M = \rho_g U_g / \rho_l U_l$ par Fernandez et al. (2009) (figure adaptée par Chaussonnet (2014)).

- **Cellular breakup** - $M < 0.5$: Comme décrit par Stapper et al. (1990), la croissance des instabilités longitudinales et transversales est similaire ce qui aboutit à la rupture de la nappe liquide en cellules organisées. L’atomisation des structures cellulaires est ensuite réalisée selon un processus équivalent à l’atomisation secondaire en sac d’une goutte, également appelée "bag-breakup" (voir partie 1.5.3) : la rupture de la membrane (zone interne de la cellule) génère alors un ensemble de très petites gouttes tandis que la fragmentation du ligament qui l’entoure (bordures de la cellule) forme de plus grosses gouttes.
- **Stretched-ligament breakup** - $0.5 < M < 4$: Les instabilités longitudinales deviennent dominantes par rapport aux instabilités transversales ce qui engendre la formation de ligaments orientés perpendiculairement par rapport à l’écoulement (Stapper et al. 1990). Les visualisations expérimentales permettent ensuite d’observer la formation de structures en forme de sac qui se désintègrent en très petites gouttes.
- **Torn-sheet breakup** - $4 < M < 20$: Le cisaillement du liquide est tel que la nappe se fragmentent en structures presque directement au niveau de la buse d’injection. La formation de gouttes se fait par l’intermédiaire de trois mécanismes : la formation et l’atomisation de ligaments, la formation et l’atomisation de structures en forme de sacs et le déchirement de la nappe liquide par le gaz.
- **Membrane-sheet breakup** - $M > 20$: Plus aucune instabilité n’est clairement identifiable. La longueur d’atomisation est très faible et les ligaments et les structures en forme de sac observés dans le Torn-sheet breakup disparaissent. La nappe liquide prend la forme d’une membrane qui en se déchirant forme un nombre très important de gouttes.

Des travaux ont récemment été conduits par Gosselin et al. (2017) sur une configuration annulaire proche d’un injecteur de type Airblast avec préfilmeur. Ils ont permis aux auteurs d’observer les régimes de "Cellular breakup" et "Stretched-ligament breakup". Ce derniers observent une transition entre les deux régimes autour de $M \approx 1$ ce qui est proche de la valeur

$M = 0.5$ proposée par Fernandez et al. (2009). Les auteurs montrent également que les vagues d'instabilité qui se développent à la surface du film restent présentes dans la zone d'atomisation primaire de la nappe et mettent en lumière un lien entre les régimes de film et d'atomisation primaire de la nappe liquide. Ainsi, lorsque le film liquide est en régime "2D periodic", la nappe est atomisée selon le mode "cellular breakup". Si le film est dans un régime de "solitary waves", la nappe se désintègre selon le mode "Stretched-ligament breakup". Même si ces travaux démontrent l'existence d'un lien entre l'écoulement du film et l'atomisation de nappe, les mécanismes d'interaction entre eux ne sont pas encore bien caractérisés.

Atomisation primaire par accumulation au niveau de la lèvre du préfilmur

Le processus d'atomisation par accumulation de liquide au niveau de la lèvre du préfilmur fut identifié lors d'une expérience conçue par Müller et al. (2004) et Gepperth et al. (2010, 2012, 2013) pour étudier finement les mécanismes d'atomisation Airblast d'un film liquide dans des conditions de fonctionnement proches de celles des injecteurs aéronautiques. La configuration expérimentale est une configuration de plaque plane qui est détaillée dans le chapitre 2. Au lieu du mécanisme attendu de formation et d'atomisation d'une nappe liquide, les auteurs ont alors observé que le liquide se stockait au niveau de la lèvre du préfilmur pour former une zone d'accumulation. Sous l'effet du cisaillement gazeux, une partie de la zone d'accumulation était ensuite étirée pour former des ligaments et des structures en forme de sac. Les ligaments se désintégraient alors en formant des grosses gouttes tandis que les sacs se fragmentaient en une multitude de petites gouttes et en quelques grosses gouttes selon un processus similaire à celui de l'atomisation secondaire d'une goutte en régime de sac (Bag breakup, voir 1.5.3). La Figure 1.19 présente des visualisations obtenues lors de cette expérience et illustre ce mécanisme d'atomisation, appelé atomisation par accumulation.

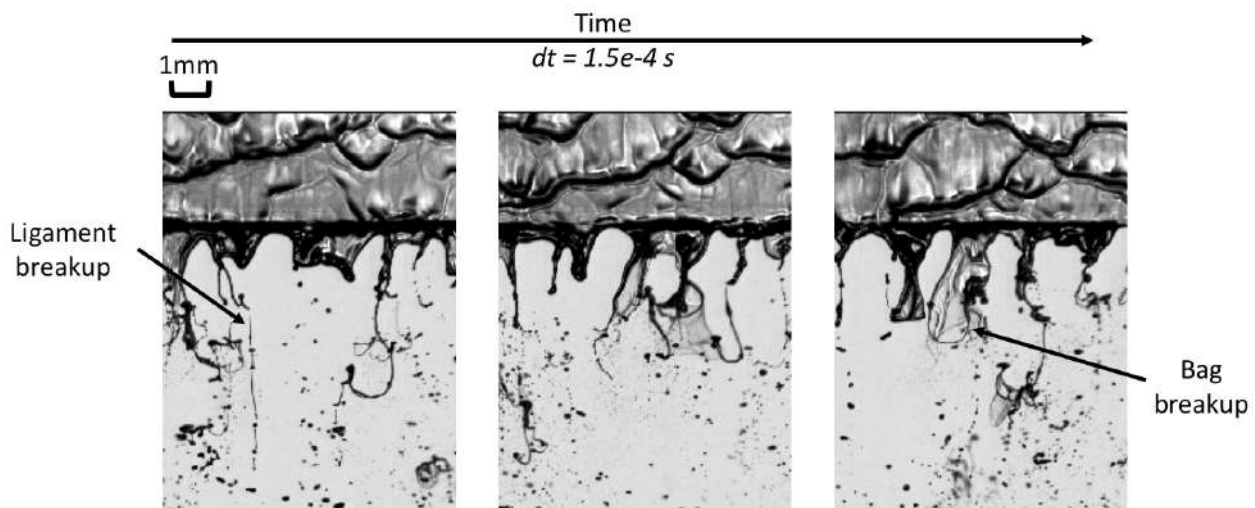
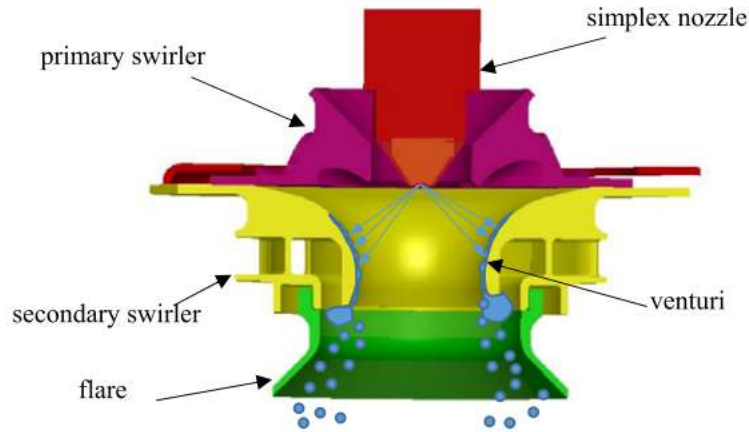


FIGURE 1.19 – Visualisations instantanées du processus d'atomisation primaire par accumulation observé dans l'expérience de Müller et al. (2004) et Gepperth et al. (2010, 2012, 2013).

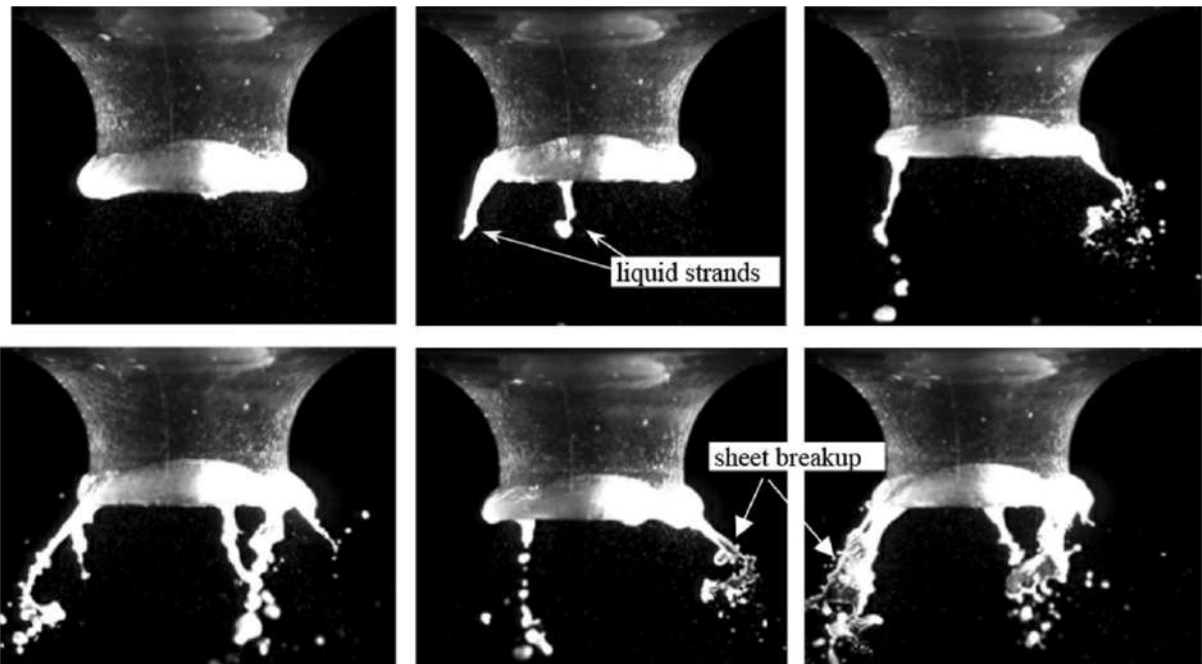
Une comparaison des fréquences d'instabilité sur le film avec celle de l'atomisation primaire a montré que, contrairement au régime de nappe liquide, ces deux phénomènes étaient ici décorrélés. Selon les expérimentateurs, ce découplage entre l'écoulement du film liquide et le

processus d'atomisation primaire serait engendré par l'accumulation de liquide au niveau de la lèvre. Cette dernière jouerait en effet le rôle d'une zone tampon pour les instabilités.

Récemment, le processus d'atomisation par accumulation a également été observé par Shanmugadas et al. (2018) lors d'une étude portant sur une configuration complète d'injecteur Airblast. Celle-ci montre que ce processus d'atomisation, illustré sur la Figure 1.20, est susceptible d'apparaître dans des injecteurs aéronautiques. Néanmoins, ce phénomène reste pour l'heure



(a) Schéma de l'injecteur.



(b) Images instantanées de l'atomisation par accumulation au niveau du venturi obtenues par une méthode TR-VLIF.

FIGURE 1.20 – Atomisation primaire par accumulation observée par Shanmugadas et al. (2018) dans une configuration d'injecteur de type Airblast avec préfilmeur. Le processus appelé "liquid strands" est assimilable à un processus d'atomisation par ligament tandis que celui appelé "sheet breakup" est à rapprocher de l'atomisation en sac observée dans la configuration de Müller et al. (2004) et Gepperth et al. (2010, 2012, 2013).

encore mal connu. C'est pourquoi, une part importante de ces travaux de thèse porte sur son étude et sa modélisation. Le chapitre 2 propose ainsi de l'examiner à travers une simulation numérique haute fidélité de la configuration de Müller et al. (2004), Gepperth et al. (2010, 2012, 2013). Puis, le chapitre 3 reprend la modélisation phénoménologique établie par Chaussonnet et al. (2016), et l'applique à la simulation d'une configuration industrielle d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.

1.5.3 L'atomisation secondaire

Contrairement à l'atomisation primaire, l'atomisation secondaire d'une structure liquide placée dans un écoulement revêt un caractère universel. En effet, elle résulte simplement d'une compétition entre les forces responsables de sa cohésion et les forces aérodynamiques qui tendent à la déstabiliser et la déformer. L'atomisation secondaire d'une goutte a notamment été étudiée par Krzeczkowski (1980) et Pilch & Erdman (1987). Ces auteurs ont montré l'existence de plusieurs régimes d'atomisation secondaire. Ils ont proposé une classification en fonction d'un nombre de Weber basé sur le diamètre d_p de la goutte et la vitesse relative de la goutte par rapport à l'écoulement gazeux ΔU .

$$We = \frac{\rho_g d_p \Delta U^2}{\sigma} \quad (1.4)$$

où ρ_g représente la masse volumique de l'écoulement gazeux et σ correspond au coefficient de tension de surface du liquide.

Les différents régimes sont schématiquement représentés sur la Figure 1.21. Ils sont les suivants :

- $We < 12$ - **Vibrational breakup** : La goutte oscille à sa fréquence propre. Sous l'influence de l'écoulement environnant, l'amplitude des oscillations finit par augmenter jusqu'à ce que la goutte se décompose en plusieurs fragments. Pilch & Erdman (1987) notent que ce mécanisme d'atomisation secondaire a un temps caractéristique très supérieur à celui des autres mécanismes. Il est pour cette raison rarement observé dans les études portant sur l'atomisation secondaire de gouttes.
- $12 \leq We \leq 50$ - **Bag breakup** : Ce régime d'atomisation peut être assimilé à l'explosion d'une bulle de savon. La goutte s'aplatit puis, est gonflée par l'écoulement gazeux créant ainsi une fine structure en forme de sac attachée à un ligament toroïdal. Lorsque sa membrane devient trop fine, le sac se désintègre et forme une multitude de gouttelettes. Le ligament se fragmente à son tour peu de temps après en un petit nombre de gouttes.
- $50 \leq We \leq 100$ - **Bag-and-stamen breakup** : Ce régime est un mode d'atomisation transitoire. Il reprend les caractéristiques principales du régime "Bag breakup" mais engendre également l'apparition d'une structure ligamentaire ("stamen") au centre du ligament toroïdal et qui s'étend dans la direction axiale de l'écoulement. Cette dernière se fragmente en un petit nombre de gouttes peu de temps après l'explosion du sac.
- $100 \leq We \leq 350$ - **Sheet stripping** : La goutte s'aplatit sous l'effet des forces aérodynamiques puis, de fines gouttes de liquide sont arrachées continuellement de ses bords

conduisant à un dépouillement progressif de la goutte.

- $350 \leq We$ - **Wave crest stripping** : La goutte s'aplatit et des vagues d'instabilité de faibles amplitudes se développent sur la partie de sa surface exposée à l'écoulement. De fines gouttes de liquide sont alors arrachées de la crête des vagues par l'action des forces aérodynamiques et la goutte est progressivement dépouillée du liquide qu'elle contient.
- $350 \leq We$ - **Catastrophic breakup** : Lorsque le Weber croît d'avantage, l'amplitude des vagues d'instabilité, qui se développent sur la surface de la goutte exposée à l'écoulement, augmente jusqu'à déstabiliser la goutte et conduire à sa fragmentation en plusieurs petites gouttes avant que l'écoulement n'ait eu le temps de la dépouiller complètement du liquide par arrachement.

Pilch & Erdman (1987) ont montré qu'il existe un nombre de Weber critique We_c en-dessous duquel la goutte reste stable et ne subit pas d'atomisation secondaire. Ils indiquent également que la valeur de ce Weber critique dépend de la capacité de la goutte à amortir les déformations par des effets de viscosités. Cette capacité est donnée par un nombre de Ohnesorge Oh .

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l d_p \sigma}} \quad (1.5)$$

où μ_l et ρ_l sont respectivement la viscosité dynamique et la masse volumique du liquide constituant la goutte. Une étude expérimentale menée en utilisant un large panel de liquide a ensuite permis aux auteurs de démontrer que le nombre de Weber critique We_c peut être estimé à partir de la corrélation empirique suivante :

$$We_c = 12 \left(1 + 1.077 Oh^{1.6} \right) \quad (1.6)$$

Il est intéressant de remarquer que les gouttes issues de l'atomisation primaire ne sont pas obligatoirement parfaitement sphériques. Cependant, malgré quelques particularités, les différents régimes détaillés précédemment décrivent globalement bien leur processus d'atomisation.

En raison du grand nombre de gouttes provenant de l'atomisation secondaire, sa caractérisation expérimentale reste complexe. Ainsi, à la connaissance de l'auteur, il n'existe que très peu d'études expérimentales quantifiant la distribution de tailles de gouttes issue de ce phénomène. Néanmoins, pour pallier ce manque, certains auteurs proposent des modélisations basées sur des considérations phénoménologiques et théoriques (Reitz 1987, O' Rourke & Amsden 1987, Apte et al. 2003). Ces modèles sont discutés plus en détail dans le chapitre 3.

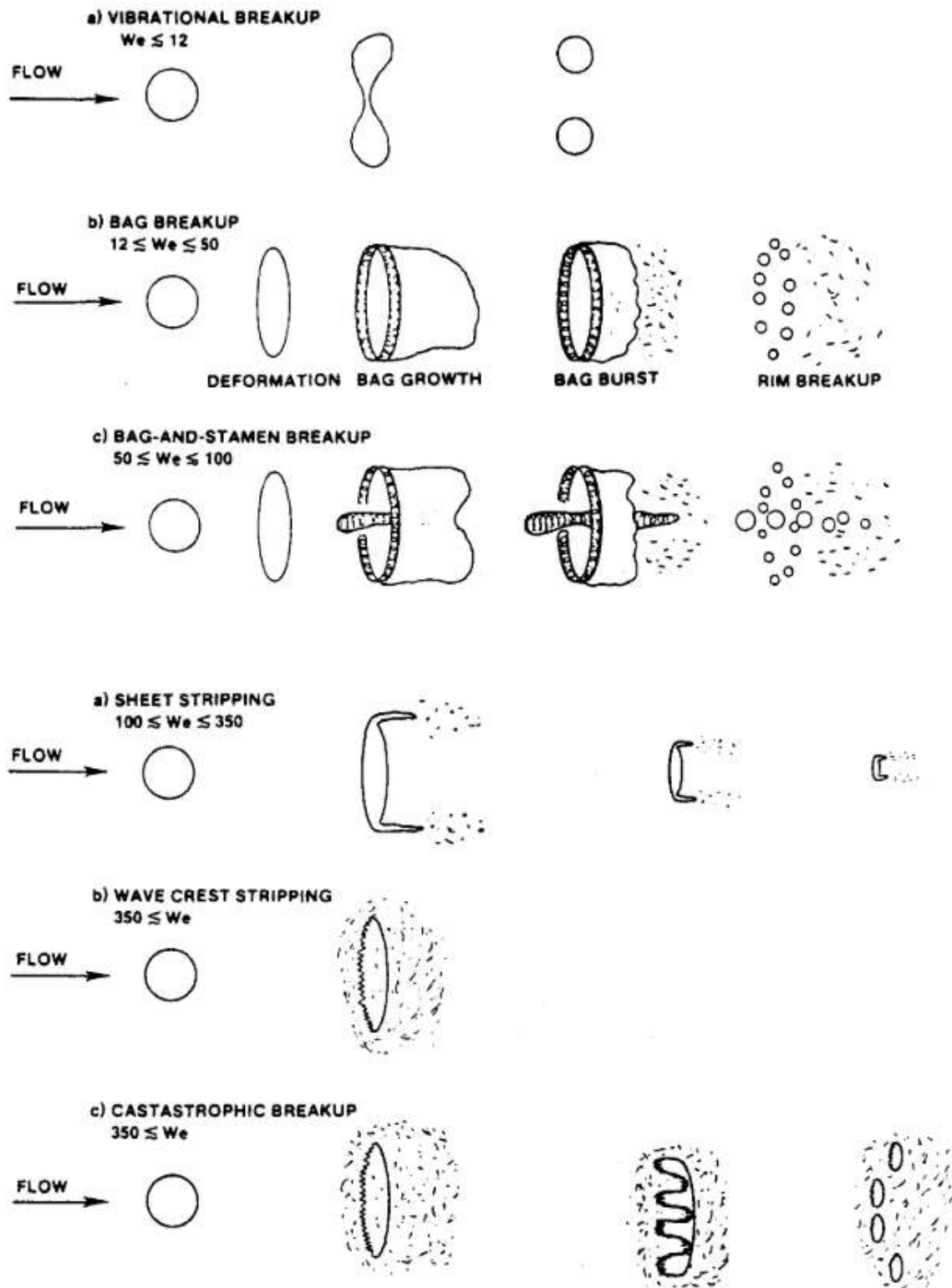


FIGURE 1.21 – Classification des différents régimes d'atomisation secondaire par Pilch & Erdman (1987).

1.6 La Simulation numérique des écoulements

1.6.1 Les équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes, qui gouvernent la mécanique des fluides, définissent un système d'équations qui expriment la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale dans un écoulement. Ces trois relations s'écrivent de la façon suivante :

- Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.7)$$

- Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P \bar{\bar{I}}) = \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} \quad (1.8)$$

- Conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \vec{u}) = \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}} \cdot \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q} + \dot{\omega}_T \quad (1.9)$$

où ρ , E , P et \vec{u} sont respectivement la masse volumique, l'énergie totale, la pression et le vecteur vitesse. Dans le cas d'un mélange gazeux composé de N espèces, comme c'est le cas par exemple des écoulements réactifs, l'équation de conservation de la masse (1.7) est remplacée par N équations de conservation de la masse des espèces. En considérant une espèce k de fraction massique Y_k , l'équation de conservation de la masse de l'espèce k prend la forme :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \vec{u}) = -\nabla \cdot \vec{J}_k + \dot{\omega}_k \quad (1.10)$$

Les termes $\dot{\omega}_T$ et $\dot{\omega}_k$ sont des termes sources d'énergie et d'espèce liés, par exemple, aux réactions chimiques. Le terme $\bar{\bar{\tau}}$, dans l'équation (1.8), représente le tenseur de contraintes visqueuses :

$$\bar{\bar{\tau}} = -\frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \vec{u} \bar{\bar{I}} + 2\mu \bar{\bar{S}} \quad (1.11)$$

$\bar{\bar{S}}$ est le tenseur des déformations et s'exprime comme $\bar{\bar{S}} = \frac{1}{2} [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T]$. L'énergie totale E présente dans l'équation (1.9) est définie comme la somme de l'énergie interne e_{int} et de l'énergie cinétique e_c du fluide considéré.

$$E = e_{int} + e_c \quad (1.12)$$

où,

$$e_{int} = \sum_k^N Y_k e_{int,k} = \sum_k^N Y_k \int_{T_0}^T C_{v,k} dT \quad (1.13)$$

et,

$$e_c = \frac{1}{2} \|\vec{u}\|^2 \quad (1.14)$$

\vec{J}_k est le flux de l'espèce k . Il s'exprime :

$$\vec{J}_k = \rho Y_k \vec{v}_k \quad (1.15)$$

où \vec{v}_k est la vitesse de diffusion de l'espèce k . Cette dernière est calculée à partir de l'approximation de Hirschfelder et al. (1954) corrigée :

$$\vec{v}_k = -D_k \frac{\nabla X_k}{X_k} + \vec{v}_c \quad (1.16)$$

où \vec{v}_c est la vitesse de correction introduite pour assurer la conservation de la masse $\sum_{k=1}^N Y_k \vec{v}_k = \vec{0}$. Elle s'exprime :

$$\vec{v}_c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \quad (1.17)$$

Notons que l'approximation de Hirschfelder et al. (1954) suppose que les effets de compressibilité ne dominent pas la diffusion des espèces et néglige l'effet Soret, qui représente la diffusion de la masse en présence d'un gradient de température, ainsi que l'effet Dufour, qui est son inverse. \vec{q} est le flux d'énergie. Il est déterminé par la relation suivante :

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k \vec{v}_k \quad (1.18)$$

Dans l'équation (1.18), λ est le coefficient de conduction thermique du mélange tandis que h_k est l'enthalpie de l'espèce k .

Propriétés de transport

La diffusion et la conduction sont des phénomènes liés au transport moléculaire. Il existe principalement deux approches pour modéliser ces propriétés. La première approche, dite complexe, est basée sur la cinétique des gaz et est utilisée couramment dans les solveurs de chimie complexe. Elle permet de déterminer les propriétés de transport de chaque espèce avec une très bonne précision mais nécessite un coût CPU important comparé à la deuxième approche dite simplifiée. En effet, bien que moins précise, l'approche simplifiée fournit une bonne estimation des propriétés de transport pour un coût CPU réduit. Cette approche est donc privilégiée lorsque, comme dans les travaux de cette thèse, les applications étudiées ne nécessitent pas une détermination précise des propriétés de transport. Notons que l'approche complexe n'est pas détaillée dans cette partie. Le lecteur intéressé pourra cependant se référer à la thèse de Felden (2017) où cette formulation est expliquée de façon détaillée.

L'approche simplifiée considère que la viscosité dynamique μ varie en fonction de la température mais est indépendante de la composition du mélange. Son comportement est donc modélisé par une simple loi d'évolution en fonction de la température comme la loi de Sutherland (1.19) ou par une "power-law" (1.20).

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S} \quad (1.19)$$

ou,

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^\beta \quad (1.20)$$

où μ_0 est la viscosité dynamique de référence du mélange prise à une température T_0 (typiquement $T_0 = 300$ K). S et β sont des paramètres choisis pour représenter au mieux la courbe analytique d'évolution.

Selon la théorie cinétique des gaz, les coefficients de diffusion D_k sont fonctions des coefficients binaires $D_{k,i}$, représentant la diffusion différentielle de l'espèce k dans l'espèce i (Hirschfelder et al. 1954). Selon Bird et al. (1960), le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange s'exprime alors :

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{i \neq k}^N X_i / D_{k,i}} \quad (1.21)$$

Cependant, de nombreux solveurs multiespèces simplifient sa détermination en approximant les coefficients D_k par un nombre de Schmidt Sc_k choisi constant pour chaque espèce :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (1.22)$$

Le nombre de Schmidt Sc_k de l'espèce k fait état du rapport entre la diffusion de quantité de mouvement du mélange (la viscosité cinématique) et la diffusion de l'espèce k dans ce dernier.

Dans le même esprit que pour les coefficients D_k , le coefficient de conduction thermique λ est déterminé en faisant l'hypothèse que le nombre de Prandtl Pr est constant dans le mélange. Ce nombre exprime le rapport entre la diffusion thermique et la diffusion de la quantité de mouvement du mélange. Il s'écrit :

$$Pr = \frac{\mu \bar{C}_p}{\lambda} \quad (1.23)$$

où \bar{C}_p est la capacité calorifique du mélange :

$$\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (1.24)$$

Connaissant le nombre de Prandtl Pr du mélange, le coefficient de conduction thermique est simplement déterminé en inversant la relation (1.23).

$$\lambda = \frac{\mu \bar{C}_p}{Pr} \quad (1.25)$$

Notons que l'approche simplifiée revient à considérer que le nombre de Lewis Le_k , défini par le rapport entre le nombre de Sc_k et le nombre de Prandtl Pr (eq. (1.26)), est constant pour chaque espèce.

$$Le_k = \frac{Sc_k}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho \bar{C}_p D_k} = cst \quad (1.26)$$

Cette hypothèse est forte et revient à négliger totalement les effets de diffusion différentielle entre les espèces. Elle se justifie cependant par la faible variation du nombre de Lewis même lorsque la température de l'écoulement change fortement. A titre d'exemple, la Figure (1.22) permet d'observer pour différentes espèces k l'évolution du nombre de Lewis Le_k dans une flamme laminaire méthane/air.

1.6.2 La fermeture thermodynamique

La résolution des équations de Navier-Stokes présentée dans la partie 1.6.1 nécessite une fermeture thermodynamique. Cette fermeture est donnée par une équation d'état qui lie la masse volumique ρ , la température T et la pression P et rend compte du comportement thermodynamique du fluide dans la plage de températures considérée pour la simulation. De nombreuses

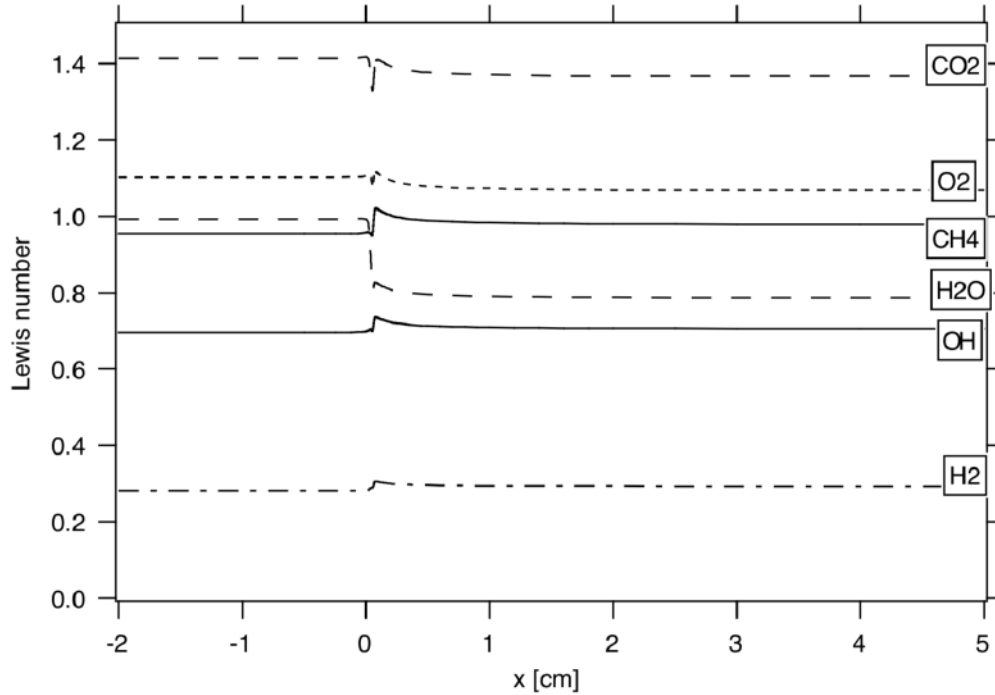


FIGURE 1.22 – Variation des nombres de Lewis des principales espèces dans une flamme laminaire méthane/air à la stœchiométrie. La figure est tirée de Poinot & Veynante (2005).

équations d'état existent. Quelques unes d'entre elles seront présentées et discutées dans la partie 4.3. La relation la plus connue est la loi des gaz parfait, utilisée dans les chapitres 2 et 3 de cette thèse. Elle s'écrit :

$$P = \rho r T \quad (1.27)$$

avec $r = R/W$. $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^1$ est la constante universelle des gaz parfait et W correspond à la masse molaire moyenne du mélange. En considérant un mélange constitué de N espèces :

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (1.28)$$

où Y_k et W_k sont respectivement la fraction massique et la masse molaire de l'espèce k .

1.6.3 Les différentes approches de simulation

Quelques mots sur la turbulence

Reynolds (1883) fut le premier à observer deux états possibles pour l'écoulement d'un fluide : laminaire ou turbulent. L'état laminaire est caractérisé par un écoulement régulier du fluide où toutes les trajectoires sont parallèles. Il correspond à un écoulement avec une vitesse suffisamment faible pour que les petites perturbations qui peuvent y apparaître soient directement amorties par la viscosité moléculaire. L'état turbulent apparaît lorsque la vitesse de l'écoulement augmente. Dans ce cas, la viscosité moléculaire n'est plus capable de dissiper l'intégralité des perturbations qui vont donc s'amplifier pour donner à l'écoulement un caractère instationnaire et turbulent, c'est-à-dire très tourbillonnaire. La turbulence est décrite par Chassaing

(2000) comme "un mode naturel de mouvement de fluides visqueux où des mécanismes internes d'échanges énergétiques assurent, au sein même de l'écoulement, la création et le maintien de toute une hiérarchie de mouvements chaotiques répartis continûment sur une large gamme d'échelles macroscopiques". Un écoulement turbulent est donc de nature instationnaire, tridimensionnel et chaotique et fait intervenir une large gamme d'échelles spatiales et temporelles. Ce type d'écoulement est très commun dans la nature et se retrouve dans la plupart des procédés industriels (turbines à gaz, fours, moteurs à combustion interne, ...). Dans ces procédés, la nature turbulente de l'écoulement est très intéressante puisqu'elle permet, par exemple, d'accélérer le mélange entre l'air et le carburant pour la combustion ou encore, d'augmenter les transferts pariétaux.

L'état laminaire ou turbulent de l'écoulement peut être déterminé en comparant les forces inertielles, qui déstabilisent l'écoulement, aux forces visqueuses, qui dissipent les perturbations. Un nombre sans dimension, appelé nombre de Reynolds Re , fait état de cette comparaison :

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (1.29)$$

où U et L sont respectivement la norme de vitesse et la taille caractéristique de l'écoulement et, ν représente la viscosité cinématique du fluide. Lorsque le nombre de Reynolds de l'écoulement est petit, l'écoulement est laminaire. A l'inverse, lorsque ce dernier est supérieur à une valeur critique, qui dépend de la géométrie du domaine dans lequel le fluide évolue (par exemple, environ 3000 dans une conduite cylindrique), l'écoulement devient turbulent.

Les structures tourbillonnaires créées dans un écoulement turbulent peuvent être définies par leur taille et leur niveau d'énergie. Selon le principe de cascade d'énergie introduit par Richardson (1920) et Kolmogorov (1941), les différentes échelles de tourbillon sont liées par un transfert d'énergie qui s'opère des plus grandes échelles, les plus énergétiques, vers les plus petites. La Figure 1.23, présentant le spectre de la densité d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ en fonction du nombre d'onde k proportionnel à l'inverse de la longueur caractéristique des tourbillons, illustre la cascade d'énergie. Comme observé sur la Figure 1.23, le spectre de l'énergie cinétique turbulente se divise en trois zones :

- **La zone intégrale :** Elle contient les plus grandes structures tourbillonnaires de l'écoulement. Ces structures sont les plus énergétiques et leur taille correspond à l'échelle intégrale l_t . Elles sont caractérisées par un nombre de Reynolds turbulent Re_t :

$$Re_t = \frac{u'l_t}{\nu} \quad (1.30)$$

où u' est la vitesse caractéristique des fluctuations de vitesse liées à l'échelle intégrale l_t .

- **La zone inertielle :** Cette zone est une région de transfert d'énergie où les grandes structures deviennent instables et se divisent en plus petites. Les petites structures ainsi formées subissent ensuite le même sort que les grandes et, créent des structures de plus en plus petites selon le principe de la cascade d'énergie de Richardson (1920) et Kolmogorov (1941). L'énergie est transmise des grandes structures vers les petites sans dissipation selon une loi $E(k) \propto k^{-5/3}$ en échelle logarithmique.
- **La zone de dissipation visqueuse :** Elle contient les plus petites structures tourbillonnaires de l'écoulement. Ces dernières sont caractérisées par l'échelle de Kolmogorov dont la longueur l_η et la vitesse u_η sont :

$$l_\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (1.31)$$

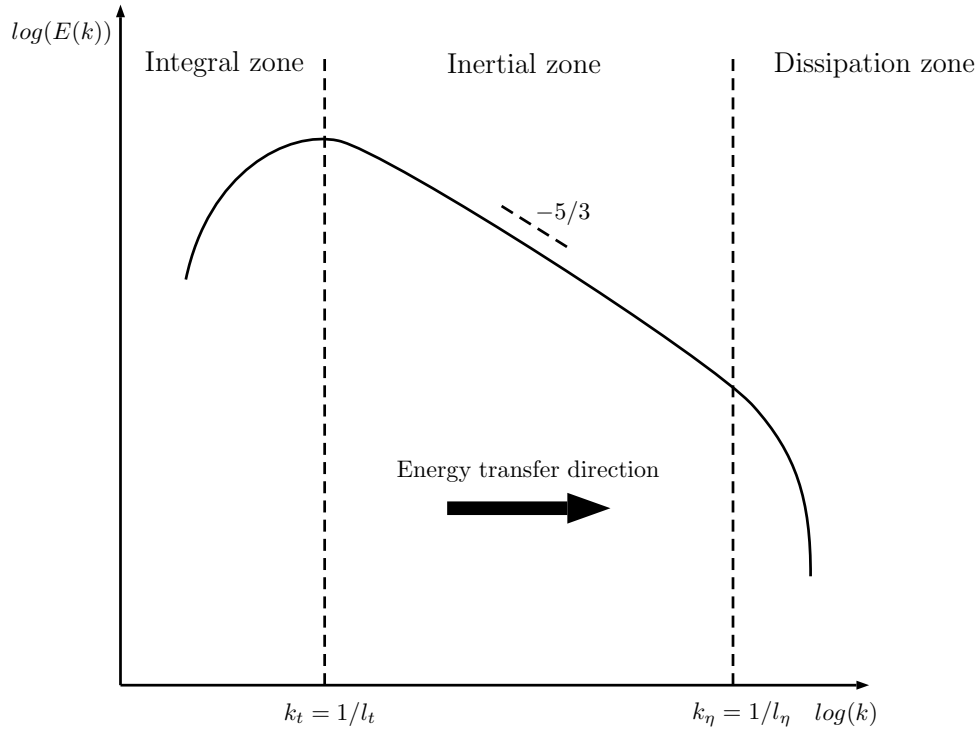


FIGURE 1.23 – Schéma représentant l'évolution du spectre de la densité d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ pour une turbulence homogène isotrope développée en fonction du nombre d'onde k en échelle logarithmique ainsi que la distinction des zones intégrales, inertielles et de dissipation visqueuse.

$$u_\eta = (\nu\epsilon)^{1/4} \quad (1.32)$$

où ϵ est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Le Reynolds Re_η , associé l'échelle de Kolmogorov, vaut 1 ce qui signifie que les plus petites échelles de l'écoulement jouent un rôle purement dissipatif et présentent un caractère isotrope et universel (les anisotropies initiales des grandes structures ayant été détruites par la cascade d'énergie). Dans cette zone, toute l'énergie cinétique turbulente est dissipée sous forme de chaleur.

$$Re_\eta = \frac{u_\eta l_\eta}{\nu} \approx 1 \quad (1.33)$$

Le rapport entre l'échelle intégral l_t et l'échelle de Kolmogorov l_η est défini par l'équation suivante :

$$\frac{l_t}{l_\eta} \approx Re_t^{3/4} \quad (1.34)$$

Ainsi, plus la turbulence dans l'écoulement est grande, c'est-à-dire plus le nombre de Reynolds Re_t est élevé, plus l'écart entre les grandes et les petites échelles de l'écoulement est grand. Or, pour résoudre une échelle sur un maillage donné, il faut que sa résolution soit au moins de l'ordre de l'échelle considérée. Ceci signifie que plus un écoulement est turbulent et plus la résolution nécessaire pour résoudre l'intégralité du spectre est élevée. Dans de nombreuses applications industrielles, et en particulier dans les applications aéronautiques visées dans cette thèse, le nombre de Reynolds turbulent Re_t est particulièrement grand (de l'ordre de quelques milliers à quelques centaines de milliers). L'écart très important d'échelles présent dans ces

écoulements a conduit au développement de différentes stratégies pour permettre la simulation des écoulements turbulents.

Stratégies pour la simulation des écoulements turbulents

Les stratégies de simulation des écoulements turbulents sont classifiées en trois types d'approches :

- **La simulation numérique directe / Direct Numerical Simulation (DNS) :** Cette approche propose de résoudre explicitement toutes les échelles de la turbulence. Ceci signifie que le maillage doit être capable de capter les échelles de dissipation visqueuse. En pratique, la taille caractéristique des cellules Δ doit satisfaire le critère de Pope (2000) :

$$\frac{\Delta}{\lambda_\eta} \leq 2.1 \quad (1.35)$$

Dans le cas de géométries industrielles complexes impliquant de forts nombres de Reynolds, cette approche conduit à des tailles de maillages hors d'atteinte avec la puissance de calcul actuellement disponible. Son utilisation se limite donc à des configurations académiques simples, comme celle simulée dans le chapitre 2.

- **La simulation Reynolds-Averaged Navier Stokes (RANS) :** Du fait de la présence de turbulence, le signal temporel renvoyé par une variable X de l'écoulement peut se décomposer en la somme de sa valeur moyenne \bar{X} et d'une composante fluctuante X' : $X(t) = \bar{X} + X'(t)$. L'idée de l'approche RANS est de résoudre uniquement les grandeurs moyennes. Les équations de Navier-Stokes moyennées font apparaître un terme à modéliser appelé tenseur de Reynolds. Comme l'illustre la Figure 1.24, tout le spectre de l'énergie cinétique turbulente est ici modélisé ce qui fait que le modèle de fermeture conditionne intégralement la résolution de la turbulence dans l'écoulement. Cette approche est très utilisée dans le contexte industriel car elle permet de simuler des configurations complexes pour un coût de calcul faible. Cependant, sa capacité de prédiction est limitée, en particulier lorsque, comme dans les configurations aéronautiques, l'écoulement considéré est très turbulent et qu'un fort couplage existe entre la turbulence et d'autres phénomènes de l'écoulement comme une flamme turbulente.
- **La simulation aux grandes échelles / Large Eddy Simulation (LES) :** La méthode LES est une approche intermédiaire entre les simulations DNS et RANS. Elle propose de résoudre les grandes échelles de la turbulence en modélisant les petites. En pratique, elle consiste à filtrer les équations de Navier-Stokes par un opérateur de filtrage spatial d'une taille donnée Δ de manière à séparer les grandes et les petites échelles. Le filtre de taille Δ peut alors être associé à une longueur d'onde de coupure k_Δ dans le spectre de l'énergie cinétique turbulente (Figure 1.24). Comme dans l'approche RANS, des termes non-fermés apparaissent lors du filtrage des équations et doivent être modélisés. Ils représentent l'effet des petites structures (non-résolues) sur les grandes (résolues). Contrairement à la méthode RANS, les structures à modéliser sont uniquement des petites structures proches de la zone de dissipation visqueuse. Elles présentent donc un caractère quasiment isotrope et universel ce qui se prête bien à la modélisation. Contrairement à l'approche RANS qui est uniquement capable de prédire les champs moyens, la modélisation LES assure une bonne prédiction du comportement instationnaire des écoulements turbulents pour un coût de calcul bien moins important que celui d'une

simulation DNS. Ceci la rend particulièrement intéressante pour la simulation de configurations industrielles complexes. Cette approche est utilisée dans le chapitre 3. Pour illustrer la prédiction donnée par la méthode LES, la Figure 1.25 présente la représentation de l'évolution temporelle d'une variable X à une position donnée de l'écoulement avec les trois approches (DNS, RANS et LES).

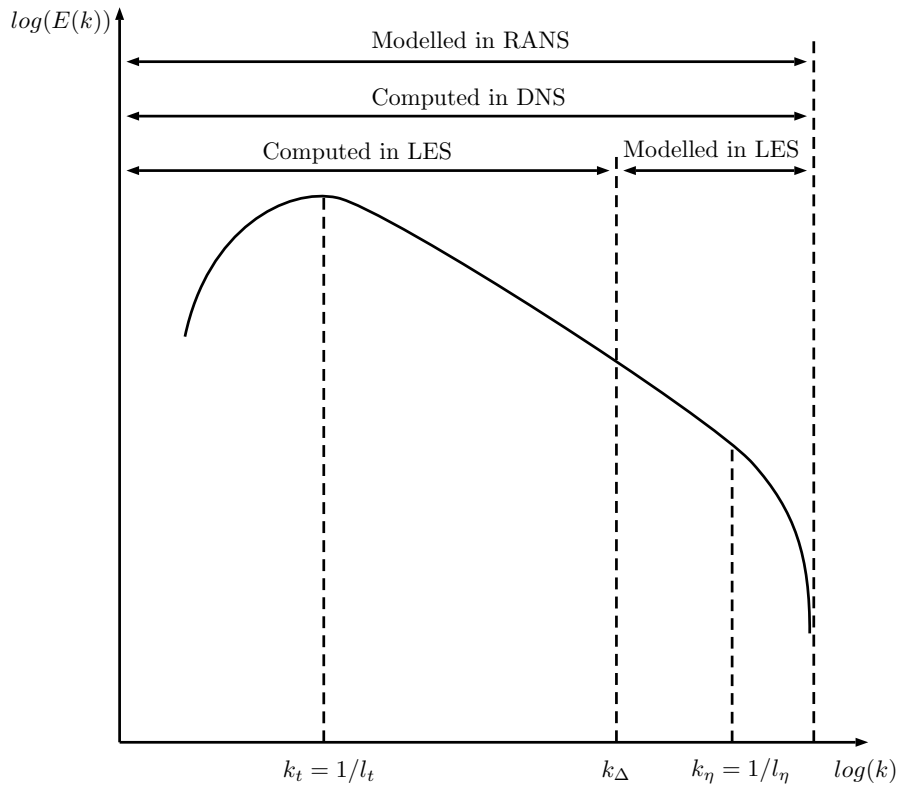


FIGURE 1.24 – Schéma représentant la partie modélisée et calculée du spectre de densité d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ en fonction du nombre d'onde k en échelle logarithmique dans les approches DNS, LES et RANS.

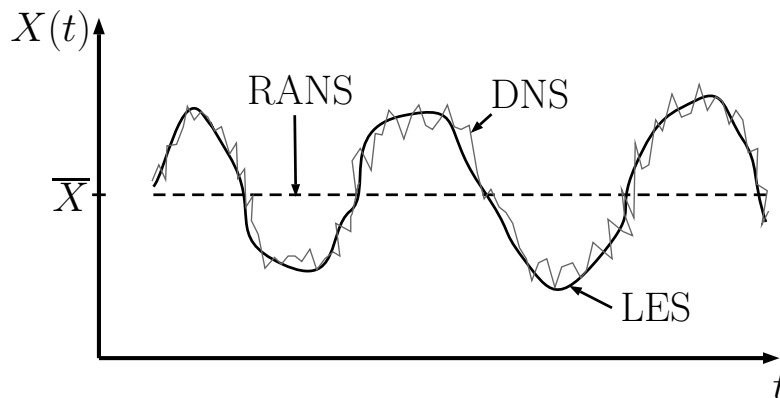


FIGURE 1.25 – Représentation schématique de l'évolution temporelle de la variable X à une position donnée de l'écoulement avec les approches DNS, RANS et LES.

1.6.4 Filtrage des équations de Navier-Stokes pour la LES

La séparation entre les grandes échelles résolues et les petites échelles modélisées pour l'approche LES est réalisée par un filtrage des équations de Navier-Stokes. Ce filtrage est un filtre passe-bas pour les échelles de la turbulence. Il se formule mathématiquement par un produit de convolution entre une variable $X(x, t)$ et un opérateur de filtrage $G_\Delta(x)$ de largeur Δ . La variable filtrée $\bar{X}(x, t)$ s'exprime alors :

$$\bar{X}(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} X(y, t) G_\Delta(x - y) dy \quad (1.36)$$

Notons que l'opérateur de filtrage respecte les conditions suivantes de normalisation (eq. (1.37)) et de commutativité temporelle (eq. (1.38)) et spatiale (eq. (1.39)).

$$\int_{\mathbb{R}^3} G_\Delta(x) dx = 1 \quad (1.37)$$

$$\frac{\partial \bar{X}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{X}}{\partial t} \quad (1.38)$$

$$\frac{\partial \bar{X}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{X}}{\partial x_i} \quad (1.39)$$

La différence entre la variable $X(x, t)$ et son état filtré $\bar{X}(x, t)$ est la partie non-résolue par le filtre de taille Δ . En prenant Δ comme la taille caractéristique des cellules du maillage, la partie non-résolue peut être vue comme une fluctuation de sous-maille, notée $X''(x, t)$. La variable $X(x, t)$ se décompose alors comme suit :

$$X(x, t) = \bar{X}(x, t) + X''(x, t) \quad (1.40)$$

Le filtrage des équations de Navier-Stokes à l'aide de l'équation (1.36) fait cependant apparaître de nombreux termes non-fermés et difficiles à modéliser entre les quantités X et la partie non-résolue de la masse volumique ρ'' (Poinsot & Veynante 2005). Pour contourner cette difficulté, un filtrage pondéré par la masse volumique, appelé filtrage de Favre, est utilisé :

$$\tilde{X} = \frac{\rho \bar{X}}{\bar{\rho}} \quad (1.41)$$

Les équations de Navier-Stokes filtrées

Afin de ne pas surcharger l'écriture, les symboles $\vec{\cdot}$ et $\bar{\cdot}$ indiquant les vecteurs et les tenseurs sont ici remplacés par une notation des variables en gras. Les équations de Navier-Stokes filtrées pour un fluide constitué de N espèces s'écrivent :

- Conservation de l'espèce k filtrée avec $k = 1, N$:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \cdot [\bar{\mathbf{J}}_k - \bar{\rho} (\tilde{Y}_k \tilde{\mathbf{u}} - \tilde{Y}_k \tilde{\mathbf{u}})] + \bar{\omega}_k \quad (1.42)$$

- Conservation de la quantité de mouvement filtrée :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}} + \bar{P} \mathbf{I}) = \nabla \cdot [\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{\rho} (\tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}})] \quad (1.43)$$

- Conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{E} \tilde{\mathbf{u}} + \bar{P} \tilde{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} \tilde{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot [-\bar{\mathbf{q}} - \bar{\rho} (\tilde{E} \tilde{\mathbf{u}} - \tilde{E} \tilde{\mathbf{u}})] + \bar{\omega}_T \quad (1.44)$$

Filtrage des termes de diffusion

Dans l'équation (1.42), le flux filtré $\overline{\mathbf{J}_k}$ de l'espèce k s'exprime :

$$\overline{\mathbf{J}_k} = \overline{\rho Y_k \mathbf{v}_k} \quad (1.45)$$

Il est estimé en négligeant les termes d'ordre élevé entre les différentes variables et s'écrit :

$$\overline{\mathbf{J}_k} \approx \overline{\bar{\rho} \bar{Y}_k \bar{\mathbf{v}}_k} \quad (1.46)$$

avec,

$$\bar{\mathbf{v}}_k = -\bar{D}_k \frac{\nabla \bar{X}_k}{\bar{X}_k} + \tilde{\mathbf{v}}_c \quad (1.47)$$

et,

$$\tilde{\mathbf{v}}_c = \sum_{k=1}^N \bar{D}_k \frac{W_k}{\bar{W}} \nabla \bar{X}_k \quad (1.48)$$

Le coefficient de diffusion filtré \bar{D}_k est approché de la même façon que $\overline{\mathbf{J}_k}$:

$$\bar{D}_k \approx \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S c_k} \quad (1.49)$$

La viscosité filtrée est estimée en prenant la viscosité du mélange à la température filtrée correspondante \tilde{T} :

$$\bar{\mu} = \mu(\tilde{T}) \quad (1.50)$$

Le tenseur des contraintes visqueuses filtré $\bar{\tau}$ dans les équations (1.43) et (1.44) est également estimé en négligeant les termes d'ordre élevé entre les différentes variables et s'écrit :

$$\bar{\tau} \approx -\frac{2}{3} \bar{\mu} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \mathbf{I} + 2\bar{\mu} \tilde{\mathbf{S}} \quad (1.51)$$

avec,

$$\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} [\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T] \quad (1.52)$$

Enfin, le flux d'énergie $\bar{\mathbf{q}}$ dans l'équation (1.44) est donné par la relation suivante :

$$\bar{\mathbf{q}} \approx -\bar{\lambda} \nabla \tilde{T} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^N \tilde{\mathbf{h}}_k \bar{Y}_k \bar{\mathbf{v}}_k \quad (1.53)$$

où le coefficient filtré de conduction thermique du mélange $\bar{\lambda}$ vaut :

$$\lambda \approx \frac{\bar{\mu} \bar{C}_p(\tilde{T})}{Pr} \quad (1.54)$$

Modélisation des termes de sous-maille

Les équations (1.42), (1.43) et (1.44) font apparaître trois termes non-résolus : $\bar{\rho} (\widetilde{Y_k \mathbf{u}} - \bar{Y}_k \tilde{\mathbf{u}})$, $-\bar{\rho} (\widetilde{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}})$ et $\bar{\rho} (\widetilde{E \mathbf{u}} - \bar{E} \tilde{\mathbf{u}})$. Ces termes sont modélisés de la façon suivante :

- Le terme $\bar{\rho} (\widetilde{Y}_k \mathbf{u} - \widetilde{Y}_k \widetilde{\mathbf{u}})$ est un flux d'espèce non-résolu, dit de sous-maille, $\overline{\mathbf{J}_k^{\text{sgs}}}$. Il est donc modélisé par analogie avec le flux résolu $\overline{\mathbf{J}_k}$.

$$\overline{\mathbf{J}_k^{\text{sgs}}} = \bar{\rho} \overline{Y_k \mathbf{v}_k^t} \quad (1.55)$$

avec,

$$\overline{\mathbf{v}_k^t} = -\overline{D_k^t} \frac{\nabla \widetilde{X}_k}{\widetilde{X}_k} + \widetilde{\mathbf{v}_c^t} \quad (1.56)$$

et,

$$\widetilde{\mathbf{v}_c^t} = \sum_{k=1}^N \overline{D_k^t} \frac{W_k}{\overline{W}} \nabla \widetilde{X}_k \quad (1.57)$$

La modélisation donnée par les équations (1.55), (1.56), (1.57) fait intervenir un coefficient de diffusion de sous-maille, appelé coefficient de diffusion turbulente, D_k^t . Il est déterminé via un nombre de Schmidt turbulent Sc_k^t .

$$D_k^t = \frac{\mu^t}{\bar{\rho} Sc_k^t} \quad (1.58)$$

Dans cette thèse, le nombre de Sc_k^t vaut 0.6 pour toutes les espèces. La viscosité turbulente μ^t est calculée à l'aide d'un modèle de sous-maille discuté dans la partie 1.6.4.

- Le terme $-\bar{\rho} (\widetilde{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{u} - \widetilde{\mathbf{u}} \otimes \widetilde{\mathbf{u}})$ correspond à un tenseur des contraintes visqueuses de sous-maille $\overline{\boldsymbol{\tau}^t}$. Comme pour le terme précédent, ce dernier est modélisé par une analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses résolues $\overline{\boldsymbol{\tau}}$ en remplaçant la viscosité par une viscosité turbulente μ^t :

$$\overline{\boldsymbol{\tau}^t} = -\frac{2}{3} \mu^t \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{u}} \mathbf{I} + 2 \mu^t \widetilde{\mathbf{S}} \quad (1.59)$$

- Le terme $\bar{\rho} (\widetilde{E} \mathbf{u} - \widetilde{E} \widetilde{\mathbf{u}})$ est un flux d'énergie de sous-maille $\overline{\mathbf{q}^t}$. Par analogie avec le flux d'énergie résolu $\overline{\mathbf{q}}$, il s'exprime :

$$\overline{\mathbf{q}^t} = -\overline{\lambda^t} \nabla \widetilde{T} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^N \widetilde{h}_k \overline{Y_k \mathbf{v}_k^t} \quad (1.60)$$

De même que pour les nombres de Schmidt turbulent Sc_k^t , le coefficient de conduction thermique du mélange en sous-maille $\overline{\lambda^t}$ est déterminé à partir d'un nombre de Prandtl turbulent Pr^t dont la valeur est fixée à 0.6 pour les calculs de cette thèse.

$$\lambda^t = \frac{\mu^t \overline{C}_p(\widetilde{T})}{Pr^t} \quad (1.61)$$

Modélisation de la viscosité turbulente

La prise en compte de l'interaction entre les échelles résolues et non-résolues est un point clé de la modélisation LES. En faisant l'hypothèse que les échelles non-résolues sont suffisamment petites, leur comportement est universel et leur contribution est purement dissipative selon la théorie de la cascade d'énergie de Richardson (1920) et Kolmogorov (1941). Basés sur cette hypothèse, les modèles utilisés dans cette thèse assimilent l'effet des échelles non-résolues à l'ajout d'une viscosité turbulente μ^t dans les équations. Les principales modélisations possibles pour cette viscosité turbulente sont données ici :

- **Le modèle de Smagorinsky :**

Introduit par Smagorinsky (1963), ce modèle propose de baser l'expression de la viscosité turbulente sur l'hypothèse d'un équilibre entre la production et la dissipation d'énergie cinétique au niveau de l'échelle de filtrage. La viscosité turbulente s'exprime alors :

$$\mu^t = \bar{\rho} (C_s \Delta)^2 |\tilde{\mathbf{S}}| \quad (1.62)$$

avec,

$$|\tilde{\mathbf{S}}| = \sqrt{2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}} \quad (1.63)$$

Δ est la taille du filtre, qui correspond à la taille de maille, et C_s est une constante appelée constante de Smagorinsky. Sa valeur varie de 0.1 à 0.2 en fonction de la configuration étudiée. Notons que la valeur 0.2 correspond à une turbulence homogène isotrope. Ce modèle est très populaire pour sa simplicité d'implémentation et a été utilisé pour simuler une large gamme de configurations d'écoulement. Il assure une bonne prédiction de la dissipation d'énergie cinétique dans une turbulence homogène isotrope. Cependant, il prédit mal la décroissance de la viscosité turbulente proche des parois et dans les zones de pur cisaillement ce qui le rend trop dissipatif.

- **Le modèle de Smagorinsky dynamique :**

Le modèle de Smagorinsky dynamique, proposé par Germano et al. (1991) et Lilly (1992), améliore le comportement du modèle Smagorinsky par un calcul local et dynamique de la constante de Smagorinsky C_s . Ce calcul est réalisé à partir des petites échelles résolues ce qui requiert un filtrage explicite du champs de vitesse résolu par un filtre de taille Δ' supérieur à Δ . En notant $\hat{\cdot}$ les grandeurs filtrées à l'aide de ce nouveau filtre, le tenseur des contraintes non-résolues $\hat{\hat{\tau}}$ s'écrit alors :

$$\hat{\hat{\tau}} = -\hat{\rho} \left(\widehat{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}} \otimes \hat{\mathbf{u}} \right) \quad (1.64)$$

Le terme $\hat{\hat{\tau}}$ ainsi que le tenseur des contraintes visqueuses de sous-maille $\tilde{\tau}$, sont donnés par le modèle de Smagorinsky :

$$\hat{\hat{\tau}} = 2\hat{\rho} (C_s \Delta')^2 |\hat{\hat{\mathbf{S}}}| \hat{\hat{\mathbf{S}}} \quad (1.65)$$

$$\tilde{\tau} = 2\bar{\rho} (C_s \Delta)^2 |\tilde{\mathbf{S}}| \tilde{\mathbf{S}} \quad (1.66)$$

La constante de Smagorinsky peut ensuite être déterminée à l'aide de l'identité de Germano et al. (1991) donnée par la relation :

$$\mathbf{L} = \tilde{\tau} - \hat{\hat{\tau}} = \bar{\rho} \left(\hat{\mathbf{u}} \otimes \hat{\mathbf{u}} - \widehat{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}} \right) \quad (1.67)$$

Le modèle de Smagorinsky dynamique est plus complexe et plus coûteux à mettre en oeuvre que le modèle de Smagorinsky. Il donne, toutefois, de bons résultats sur une large gamme d'applications avec, en particulier, une meilleur modélisation de la viscosité turbulente dans les zones de cisaillement. Il est également capable de prédire le transfert d'énergie cinétique turbulente des structures non-résolues vers celles résolues. Ce phénomène, appelé "backscatter" (Leslie 1979), est pris en compte dans le modèle par l'apparition d'une anti-diffusion (viscosité turbulente négative). Cette particularité est intéressante du point de vue de la modélisation mais peut, cependant, poser des problèmes de stabilité numérique.

- **Le modèle WALE :**

Le modèle WALE (Wall-Adaptating Local Eddy-viscosity) a été conçu par Nicoud & Ducros (1999) dans le but d'améliorer la modélisation de la viscosité turbulente en proche paroi. Cette dernière est définie comme :

$$\mu^t = \bar{\rho} (C_w \Delta)^2 \frac{(\mathbf{s}^d : \mathbf{s}^d)^{3/2}}{(\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}})^{5/2} + (\mathbf{s}^d : \mathbf{s}^d)^{5/4}} \quad (1.68)$$

avec,

$$\mathbf{s}^d = \frac{1}{2} \left(\tilde{\mathbf{g}}^2 + (\tilde{\mathbf{g}}^T)^2 \right) - \frac{1}{3} \tilde{\mathbf{g}}^2 \mathbf{I} \quad (1.69)$$

où $\tilde{\mathbf{g}}$ fait référence au tenseur des gradients de la vitesse filtrée $\tilde{\mathbf{g}} = \nabla \tilde{\mathbf{u}}$. Le terme C_w dans l'équation (1.68) est une constante du modèle établie à $C_w = 0.4929$.

- **Le modèle SIGMA :**

Proposé par Nicoud et al. (2011), le modèle SIGMA admet, comme le modèle WALE, un bon comportement de la viscosité turbulente en proche paroi mais améliore également la prédiction de la turbulence dans les écoulements tournants. Il est donc particulièrement intéressant pour l'étude de configurations industrielles telles que des injecteurs aéronautiques où l'écoulement tourne fortement. La viscosité turbulente est ici calculée à partir des valeurs propres $\sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \sigma_3$ du tenseur des gradients de la vitesse filtrée $\tilde{\mathbf{g}}$.

$$\mu^t = \bar{\rho} (C_\sigma \Delta)^2 \frac{\sigma_3 (\sigma_1 - \sigma_2) (\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2} \quad (1.70)$$

où $C_\sigma = 1.35$ est une constante du modèle.

1.6.5 La résolution numérique du système

La résolution analytique des équations de Navier-Stokes n'est généralement pas possible, en particulier pour les cas multidimensionnels. La stratégie la plus couramment utilisée consiste donc à diviser spatialement le domaine fluide Ω en un nombre fini d'éléments puis, d'approcher la solution du système en chaque position à l'aide d'opérateurs différentiels. Cette procédure est appelée méthode numérique.

Le maillage

La décomposition du domaine fluide Ω en un nombre fini d'éléments ε_i est appelée maillage. Les maillages peuvent être classés selon deux grandes familles en fonction de l'arrangement des éléments entre eux :

- **Les maillages structurés** sont constitués d'éléments obtenus par une décomposition du domaine Ω en lignes ou en plans réguliers. De cette manière, excepté sur les bords du domaine, tous les sommets des éléments ont un nombre de voisins similaire. L'identification d'un élément et de ses voisins peut alors être réalisée très facilement via leurs positions dans une matrice. Bien que son utilisation soit limitée à des géométries simples, ce type de maillage a l'avantage d'être très facile à implémenter et à utiliser dans un code de calcul. L'agencement simple des éléments permet en outre d'allier l'utilisation de méthodes numériques très robustes et précises avec un faible coût de calcul. Les maillages structurés sont donc privilégiés pour les études académiques, comme celle réalisée dans le chapitre 2.

- **Les maillages non-structurés** sont constitués d'éléments pouvant avoir des formes géométriques différentes. Le nombre de voisins respectifs aux sommets des éléments varie par conséquent fortement sur le maillage. L'identification d'un élément et de ses voisins passe donc nécessairement par le stockage de sa position et de la liste de ses voisins dans un tableau appelé tableau de connectivité. Ce type de maillage permet de décomposer des domaines de calcul très complexes à l'image de ceux rencontrés dans de nombreuses configurations industrielles. L'hétérogénéité des éléments ainsi que la localisation des voisins via un tableau de connectivité nécessite cependant l'utilisation de méthodes numériques spécifiques qui garantissent la stabilité de la solution tout en utilisant un stencil compact pour éviter des coûts de calcul trop importants liés à la recherche de voisins indirects.

Représentation de la solution

Une fois que la géométrie du maillage est définie, il existe plusieurs façon de décrire localement la solution. L'approche aux différences finies peut par exemple être utilisée. Dans ce cas, le problème est assimilé à un problème discret où la solution est représentée par l'ensemble des valeurs aux noeuds du maillage. Une autre approche consiste à voir la solution comme un ensemble de valeurs moyennes dans des volumes disjoints, appelés volumes de contrôle. Comme nous le verrons dans le chapitre 4, cette méthode est particulièrement intéressante pour la résolution des équations de Navier-Stokes puisqu'elle permet d'appliquer le théorème de Green-Ostrogradski qui transforme l'intégrale d'une divergence sur un volume en une intégrale sur une surface. La résolution du système revient alors à évaluer les flux aux interfaces des volumes de contrôle. Il existe principalement trois formulations de l'approche aux volumes finis.

- **L'approche "Cell-centered"** est la plus classique. Les volumes de contrôle y sont définis en reliant les noeuds du maillage entre eux pour former des cellules. La divergence des flux est alors calculée à partir d'une procédure d'intégration à travers les différentes faces de la cellule et les variables conservatives sont souvent mises à jour et stockées au centre de la cellule. Le solveur NGA utilisé dans le chapitre 2 se base sur une approche de ce type.
- **L'approche "Vertex-centered" ou "Node-centered"** est relativement proche de l'approche "Cell-centered". Le volume de contrôle y est cependant construit en reliant les centres des cellules entre eux. Le volume de contrôle créé est appelé volume dual. Les variables conservatives sont alors calculées aux noeuds où elles sont également stockées.
- **L'approche "Cell-Vertex"** est une approche hybride. Les flux sont calculés à travers les faces du volume de contrôle de la cellule comme pour l'approche "Cell-centered" mais les variables conservatives sont mises à jour et stockées aux noeuds. Cette approche est indépendante de la géométrie des cellules ce qui la rend particulièrement intéressante pour traiter des maillages hybrides et non-isotropes. Elle est pour cette raison utilisée par la majorité des méthodes numériques disponibles dans le code AVBP.

Formulations et schémas numériques

Deux types d'approche existent pour résoudre la partie convective des équations de Navier-Stokes sous leur forme classique (voir partie 1.6.1) ou filtrée (voir partie 1.6.4) sur un maillage donné.

La première approche, appelée compressible, consiste à résoudre l'écoulement en discrétisant directement les équations en espace et en temps à l'aide d'un schéma numérique. Cette approche, utilisée dans les chapitres 3 et 4 avec le code AVBP, est la méthode la plus intuitive et la plus complète puisqu'elle ne demande aucune hypothèse sur la nature de l'écoulement à résoudre. La précision des résultats dépend ensuite des erreurs spatiale et temporelle du schéma numérique utilisé. Ainsi, les schémas numériques Lax-Wendroff (Lax & Wendroff 1960) d'ordre 2 en espace et en temps et TTGC - Two-Step Taylor Galerkin - (Colin & Rudgyard 2000) d'ordre 3 en espace et en temps sont, par exemple, utilisés dans le chapitre 3. L'écriture de ces schémas n'est pas explicitée dans cette thèse mais le lecteur intéressé pourra se reporter aux publications de référence données précédemment ou encore à la thèse de Lamarque (2007) qui présente leur implémentation ainsi que leur validation dans le code AVBP. Les calculs réalisés dans le chapitre 4 utilisent quant à eux un schéma numérique spatial de Godunov (1959) d'ordre 2 couplé avec un schéma temporel de Runge-Kutta d'ordre 2. Son développement et sa validation sont présentés dans ce même chapitre.

La seconde approche consiste à faire l'hypothèse que la vitesse de l'écoulement est suffisamment faible pour que la vitesse des ondes acoustiques puisse être considérée comme infiniment rapide devant celle de l'écoulement. Cette hypothèse, raisonnable lorsque le nombre de Mach Ma de l'écoulement est modéré (typiquement $Ma \leq 0.3$), conduit à négliger les phénomènes acoustiques dans le domaine. Ceci permet d'éviter sa résolution ce qui offre la possibilité d'augmenter le pas de temps et ainsi de diminuer le coût des calculs. Il peut alors être montré, à l'aide d'un développement asymptotique des variables de l'écoulement en nombre de Mach, que cette hypothèse équivaut à résoudre les équations de Navier-Stokes sous leur forme incompressible. Les opérateurs spatiaux sont alors discrétisés à l'aide d'un schéma numérique spatial, comme par exemple un schéma centré aux différences finis qui est de second ordre. Puis, l'avancement temporel est réalisé à partir de la méthode de projection développée par Chorin (1968) et modifiée ensuite par Kim & Moin (1985). Cette technique repose sur une décomposition d'Helmholtz du champ de vitesse \vec{u} en une partie irrotationnelle ($\nabla \times \vec{u} = 0$) et une partie solénoïdale ($\nabla \cdot \vec{u} = 0$) pour résoudre l'équation de quantité de mouvement en deux étapes (une étape de prédiction de la vitesse puis une étape de correction). Les détails de cette approche ne sont pas donnés dans ce manuscrit mais le lecteur intéressé pourra se référer aux articles de Chorin (1968) et Kim & Moin (1985) où ils sont explicités en détails. Le code NGA, utilisé dans le chapitre 2, se base sur ce formalisme.

1.7 La simulation des écoulements diphasiques

Le panel très large de temps et de longueurs caractéristiques des phénomènes physiques diphasiques présents simultanément dans des configurations complexes rend leurs simulations particulièrement épineuses. La génération d'un spray issu d'un injecteur aéronautique en Figure 1.26 permet, par exemple, d'observer non-seulement la présence d'une zone dense en sortie d'injecteur, où le liquide est sous la forme d'une nappe, mais aussi celle d'un spray constitué d'une multitude de très petites gouttes formées par l'atomisation primaire et secondaire du liquide. Deux approches existent alors pour simuler ce type d'écoulement.

La première approche consiste à considérer un écoulement diphasique où deux phases co-existent et sont séparées par une interface. Cette dernière doit alors être modélisée et sa dynamique est résolue sur le maillage. Les techniques de modélisation de l'interface se classent selon deux catégories. La première est la catégorie des interfaces raides, où l'interface entre les

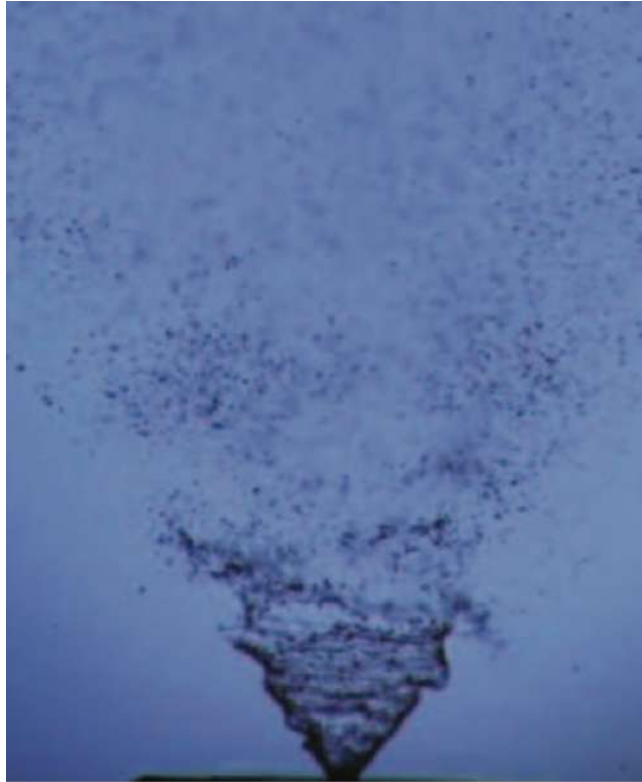


FIGURE 1.26 – Photographie du spray de carburant SAFIR issue des travaux de Cessou et al. (2010).

phases liquide et gazeuse est décrite par une discontinuité qui est transportée dans l'écoulement. La seconde est la catégorie des interfaces diffuses, où l'interface est décrite par une zone d'épaisseur finie à travers laquelle les variables de l'écoulement évoluent rapidement mais de façon continue. Ce type d'approche, dite à interface résolue, est très intéressante puisqu'elle permet de simuler finement le comportement de l'interface liquide/gaz avec, par exemple, la naissance d'instabilités à sa surface ou encore sa désintégration en ligaments puis, en gouttes lors de l'atomisation. La nécessité de discrétiser finement la zone proche de l'interface peut, cependant, rendre son utilisation très coûteuse lorsque les structures deviennent très petites et que leur nombre devient très important. C'est par exemple le cas pour les sprays formés par les injecteurs aéronautiques, où la taille caractéristique des gouttes est de l'ordre de $\approx 50\mu m$ et leur nombre peut atteindre plusieurs millions.

La seconde approche propose de contourner ce problème en décrivant directement la phase liquide comme un ensemble de gouttes sphériques. Ces gouttes ne sont pas directement résolues sur le maillage mais sont plutôt vues comme des inclusions ponctuelles dans l'écoulement gazeux définies par un ensemble de propriétés (diamètre, vitesse, température, etc.). Les phénomènes physiques qu'elles subissent (atomisation, évaporation, etc.) ainsi que leurs interactions avec les phases liquide et gazeuse sont alors simplement pris en compte par un ensemble de modèles phénoménologiques et non par une résolution directe de la dynamique de leur interface. Le comportement du spray de gouttes peut être décrit soit en considérant chaque goutte de manière individuelle (formalisme Lagrangien), soit en les rassemblant localement pour former des populations statistiques (formalisme Eulerien). Moins coûteuse en temps de calcul que l'approche résolue, cette approche possède cependant l'inconvénient majeur d'être uniquement

valide pour simuler des sprays établis et dilués dans l'écoulement gazeux. La formation du spray issu d'un injecteur ne peut donc pas être directement simulée et ne peut se faire que par des modèles empiriques ou phénoménologiques établis à partir d'expériences ou de considérations théoriques.

Cette partie présente une revue des principales méthodes existantes pour réaliser des simulations avec une approche à interface résolue. La méthode Lagrangienne sera quant à elle directement décrite au début du chapitre 3 où elle sera également appliquée pour réaliser la simulation d'une configuration académique d'atomisation Airblast ainsi que d'un injecteur aéronautique. La méthode Eulérienne n'est pas utilisée dans cette thèse et n'y est pour cette raison pas détaillée. Le lecteur intéressé pourra toutefois se référer à la thèse de Riber (2007) s'il désire se renseigner sur ce type de méthode.

1.7.1 Les méthodes aux interfaces raides - "Sharp-interface methods"

Dans les méthodes aux interfaces raides, l'interface entre les phases liquide et gazeuse est décrite par une discontinuité. Partant de cette représentation, diverses stratégies ont alors été proposées pour transporter cette discontinuité, reconstruire sa topologie et gérer l'évolution des deux phases de part et d'autre de l'interface. Les trois approches les plus connues sont présentées dans cette section.

La méthode Volume of Fluid

Originellement introduite par Noh & Woodward (1976) puis Hirt & Nichols (1981), la méthode Volume of Fluid (VOF) est une approche Eulérienne qui se base sur le transport de la fraction volumique locale de liquide α , aussi appelée fonction VOF, pour localiser l'interface. L'équation d'advection de cette quantité se formule de la façon suivante :

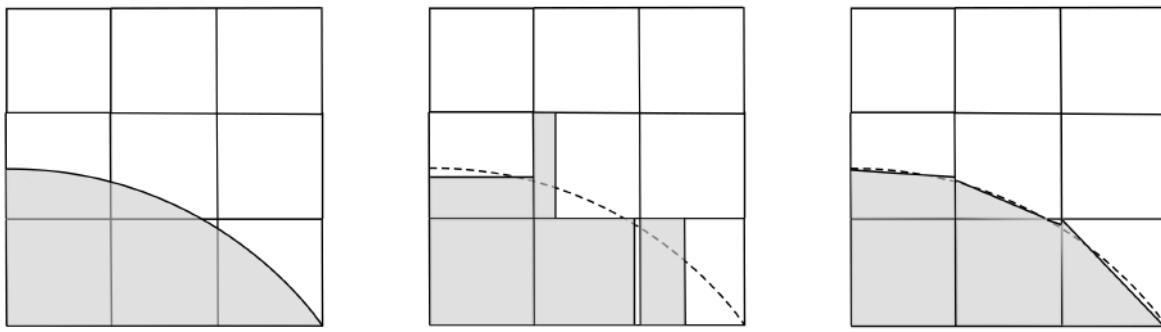
$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha = 0 \quad (1.71)$$

Il existe deux approches de méthodes VOF. Initialement proposée par Hirt & Nichols (1981), la première consiste à utiliser des schémas spécifiques d'ordre élevé pour éviter la diffusion numérique de l'interface lors du transport et ainsi préserver sa raideur. Il existe de nombreux travaux qui traitent du développement de tels schémas numériques. Le lecteur intéressé pourra par exemple se référer aux publications de Lafaurie et al. (1994), Ubbink & Issa (1999), Tsui et al. (2009), Patel & Natarajan (2015). La seconde approche se base sur une reconstruction géométrique de l'interface à partir de la fonction VOF pour déterminer sa position exacte. La reconstruction la plus élémentaire consiste à considérer que l'interface est localement parallèle à l'une des faces de la cellule. Cette méthode, appelée Simple Line Interface Reconstruction (SLIC), a été initialement développée par Noh & Woodward (1976). Elle a pour principal avantage d'être facile à implémenter et peu coûteuse. Une reconstruction plus précise peut, toutefois, être obtenue avec la méthode Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC) de Youngs (1982). Cette dernière représente localement l'interface par un plan orienté. La Figure 1.27 fournit un exemple d'une interface reconstruite avec les méthodes SLIC et PLIC. La précision de la reconstruction via la méthode PLIC est fortement liée au calcul de la normale à l'interface qui est ensuite utilisée pour orienter le plan. Parker & Youngs (1992) proposent de déterminer simplement cette normale à partir du sens du gradient de la fonction VOF $\nabla \alpha$. Malheureusement, Pilliod & Puckett (2004) ont montré que cette technique ne permet pas

de positionner les plans orientés dans toutes les cellules avec une précision de second ordre. Cette précision peut être atteinte avec la méthode "Least-square VOF interface reconstruction algorithm" (LVIRA) de Pilliod & Puckett (2004). Elle consiste à trouver la normale à l'interface $\vec{n}_{i,j}$ en minimisant la norme L^2 de l'erreur $E_{i,j}^2$ entre la valeur de la fonction VOF des voisins directs de la cellule $\alpha_{i,j}$ et sa valeur extrapolée $\tilde{\alpha}_{i,j}(\vec{n}_{i,j})$:

$$E_{i,j}^2 = \left[\sum_{k,l=-1}^1 (\tilde{\alpha}_{i+k,j+l}(\vec{n}_{i+k,j+l}) - \alpha_{i+k,j+l})^2 \right] \quad (1.72)$$

Cette méthode a été optimisée par Pilliod & Puckett (2004) dans le cas des maillages structurés pour donner l'algorithme Efficient LVIRA (ELVIRA) qui réduit le problème de minimisation à seulement six normales candidates pour la reconstruction grâce à une méthode aux différences finies appliquée à la fonction VOF dans les cellules voisines. Cette méthode est implémentée dans le solveur NGA utilisé dans le chapitre 2. Notons qu'il existe de nombreuses autres stratégies pour déterminer la normale à l'interface parmi lesquelles nous pouvons citer la méthode geometric-least-squares (GLS) de Mosso et al. (1996), adaptée aux maillages non-structurés, la méthode Moment-of-Fluid (MOF) de Dyadechko & Shashkov (2005), qui transporte le centre de masse du liquide en plus de la fonction VOF, ou encore, la méthode Coupled Level-Set and Volume-Of-Fluid (CLSVOF) de Sussman & Puckett (2000) où la normale est déterminée grâce au transport d'une fonction Level-Set.



(a) Position réelle de l'interface (b) Reconstruction SLIC (c) Reconstruction PLIC

FIGURE 1.27 – Exemple de reconstruction d'interface avec les méthodes SLIC et PLIC.

La Figure 1.28 donne un exemple d'application de la méthode VOF au calcul d'un jet d'eau. Il convient d'observer la très bonne description des processus d'atomisation avec la formation de ligaments qui se scindent ensuite en petites gouttes.

La méthode Level-Set

Proposée par Osher & Sethian (1988) pour le traitement de problèmes tels que la propagation de fronts de flamme ou bien la croissance de cristaux, la méthode Level-Set se base sur l'idée de représenter l'interface à partir d'une valeur d'isocontour d'une fonction scalaire transportée dans l'écoulement. Cette stratégie a, par la suite, été appliquée par Mulder & Osher (1992) et Sussman et al. (1994) pour traiter des écoulements diphasiques. Ces premiers travaux proposent de définir la fonction scalaire Φ , également appelée fonction Level-Set, comme la distance signée



FIGURE 1.28 – Atomisation d’un jet d’eau liquide par Le Chenadec & Pitsch (2013)

d à l’interface Γ .

$$|\Phi(\vec{x}, t)| = |d(\vec{x}, t)| = \min_{\vec{x}_I \in \Gamma} |\vec{x} - \vec{x}_I| \quad (1.73)$$

La fonction Φ prend, par exemple, une valeur négative dans le gaz et positive dans le liquide. La position de l’interface est alors définie par l’isocontour $\Phi(\vec{x}, t) = 0$ et sa dynamique est prise en compte grâce au transport de la fonction Φ dans l’écoulement via l’équation suivante :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \Phi = 0 \quad (1.74)$$

La diffusion numérique engendrée par la résolution de l’équation (1.74) ne garantit malheureusement pas que la fonction Φ garde les caractéristiques d’une fonction distance signée au cours du temps. Ce problème est traité par l’ajout d’une procédure de réinitialisation après chaque itération de transport de la fonction Level-Set. Sussman et al. (1994) écrivent cette dernière comme une résolution stationnaire de la relation de raidissement suivante :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} = \text{sign}(\Phi) (1 - |\nabla \Phi|) \quad (1.75)$$

En théorie, l’équation de réinitialisation (eq. (1.75)) conserve la position de l’isocontour $\Phi(\vec{x}, t) = 0$. Toutefois, sa résolution numérique génère des erreurs qui modifient sa position et déplacent donc l’interface artificiellement. Ce phénomène, auquel il faut ajouter les erreurs de transport liées à la formulation non-conservative de l’équation (1.74), a pour conséquence d’engendrer des erreurs très importantes de conservation de la masse. Ainsi, bien que ce type de méthode permette une localisation très précise de l’interface, ce défaut de conservation de la masse a largement freiné son développement durant de nombreuses années.

Olsson & Kreiss (2005, 2007) ont cependant montré que l’utilisation d’une fonction scalaire Ψ de forme tangente hyperbolique, à la place de la fonction distance signée Φ , couplée à une équation de transport conservative, permet d’améliorer la conservation de la masse. Cette méthode est appelée Conservative Level-Set (CLS). La fonction Ψ y est exprimée de la façon suivante :

$$\Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\tanh \left(\frac{\Phi(\vec{x}, t)}{2\epsilon} \right) + 1 \right) \quad (1.76)$$

où ϵ est un paramètre qui contrôle l'épaisseur du profil. L'interface est alors représentée par l'isocontour $\Psi(\vec{x}, t) = 0.5$ au lieu de l'isocontour $\Phi(\vec{x}, t) = 0$. Comme évoqué précédemment, la fonction Ψ est transportée dans l'écoulement via la forme conservative de l'équation (1.74) qui s'écrit :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \Psi) = 0 \quad (1.77)$$

De la même façon que pour la fonction Φ , le transport de Ψ à l'aide de l'équation (1.77) n'assure pas de préserver le profil de tangente hyperbolique au cours du temps. Olsson & Kreiss (2007) introduisent donc la procédure de réinitialisation suivante :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \nabla \cdot (\epsilon (\nabla \Psi \cdot \vec{n}) \vec{n} - \Psi (1 - \Psi) \vec{n}) \quad (1.78)$$

où \vec{n} correspond au vecteur normal à l'interface. Il est calculé à partir de la fonction Ψ :

$$\vec{n} = \frac{\nabla \Psi}{|\nabla \Psi|} \quad (1.79)$$

Desjardins, Moureau & Pitsch (2008) observent, toutefois, que l'expression proposée par Olsson & Kreiss (2007) est très sensible aux erreurs numériques ce qui conduit notamment à l'apparition d'oscillations parasites de l'interface. Ils proposent donc une méthode, appelée Accurate Conservative Level-Set (ACLS), qui estime la normale à partir du champs de distance signée Φ reconstruit à partir de Ψ à l'aide d'un algorithme "Fast Marching". La normale à l'interface est maintenant donnée par l'équation :

$$\vec{n} = \frac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|} \quad (1.80)$$

La distance signée Φ étant une fonction par nature moins raide au niveau de l'interface que la fonction tangente hyperbolique Ψ , le calcul du gradient dans l'équation (1.80) est moins sujet aux erreurs numériques et l'estimation de la normale est largement améliorée. Cette stratégie est restée durant de nombreuses années la méthode de référence pour les simulations diphasiques avec Level-Set.

Récemment, Chiodi & Desjardins (2017b) ont proposé d'améliorer la précision de la méthode ACLS en retravaillant l'expression de la fonction de réinitialisation du profil. En effet, comme illustré dans la Figure (1.29), en partant d'une goutte parfaitement sphérique et en l'absence de transport et de diffusion, une déformation significative de l'interface peut être observée après seulement 1000 itérations. Chiodi & Desjardins (2017b) incriminent les termes liés à la fonction Ψ dans la partie droite de l'équation de réinitialisation (1.78) comme coupable de ces erreurs numériques. Ils proposent alors une réécriture de cette équation en ne faisant plus intervenir directement ces termes :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \nabla \cdot \left[\frac{1}{4 \cosh^2 \left(\frac{\Phi_{map}}{2\epsilon} \right)} (|\nabla \Phi_{map} \cdot \vec{n}| - 1) \vec{n} \right] \quad (1.81)$$

où Φ_{map} est une fonction directement déterminée à partir du champs de Ψ :

$$\Phi_{map} = \epsilon \ln \left(\frac{\Psi}{1 - \Psi} \right) \quad (1.82)$$

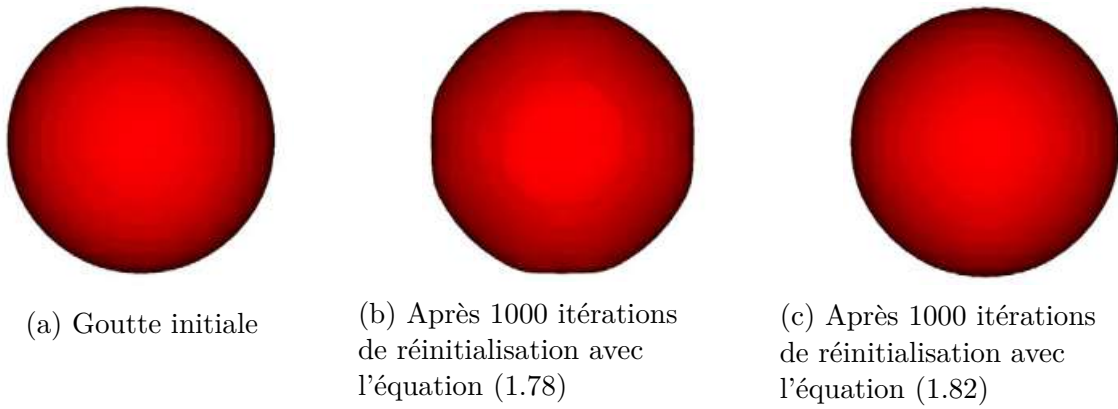


FIGURE 1.29 – Evolution de la forme d'une goutte initialement sphérique après 1000 itérations de réinitialisation. La goutte est résolue avec 20 points dans le diamètre. Les figures sont issues de Chiodi & Desjardins (2017*b*).

Cette fonction est également utilisée pour calculer la normale à l'interface \vec{n} via une relation similaire à l'équation (1.80) :

$$\vec{n} = \frac{\nabla\Phi_{map}}{|\nabla\Phi_{map}|} \quad (1.83)$$

La figure 1.30 donne un exemple de l'atomisation d'un jet liquide simulée par Chiodi & Desjardins (2017*b*).

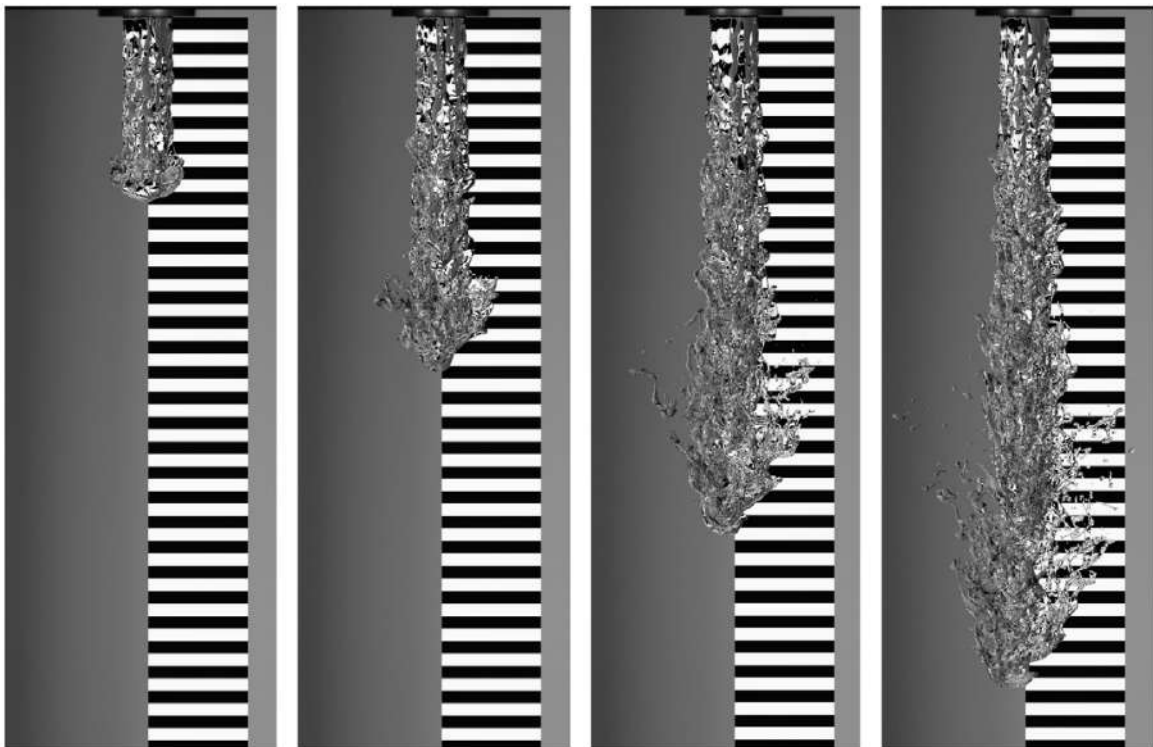


FIGURE 1.30 – Atomisation d'un jet liquide turbulent par Chiodi & Desjardins (2017*b*).

Notons pour finir que la méthode Level-Set s'intègre particulièrement bien dans les solveurs

non-structurés. Malgré la possibilité de simuler des configurations géométriques complexes, l'estimation de la courbure de l'interface est cependant sujette à de nombreuses erreurs sur ce type de maillage engendrant notamment l'apparition de courants parasites et des déstabilisations numériques de l'interface. Toutefois, Janodet et al. (2019, 2020) ont très récemment proposé une méthode numérique robuste qui réduit drastiquement les erreurs numériques liées à ce type de maillage. Alliant l'utilisation d'une méthode de projection, appelée *geometric projection/marker method* (GPMM), pour reconstruire le champ de la fonction de distance signée Φ , avec un raffinement dynamique de maillage pour préserver une discrétisation précise et homogène dans la région autour de l'interface, la méthodologie de Janodet et al. (2019, 2020) ouvre la porte à la simulation haute fidélité avec des codes non-structurés et massivement parallèles de cas canoniques, tels que des impacts de gouttes (Figure 1.31a), et de cas aux géométries complexes, tels que celui présenté dans la Figure 1.31b.

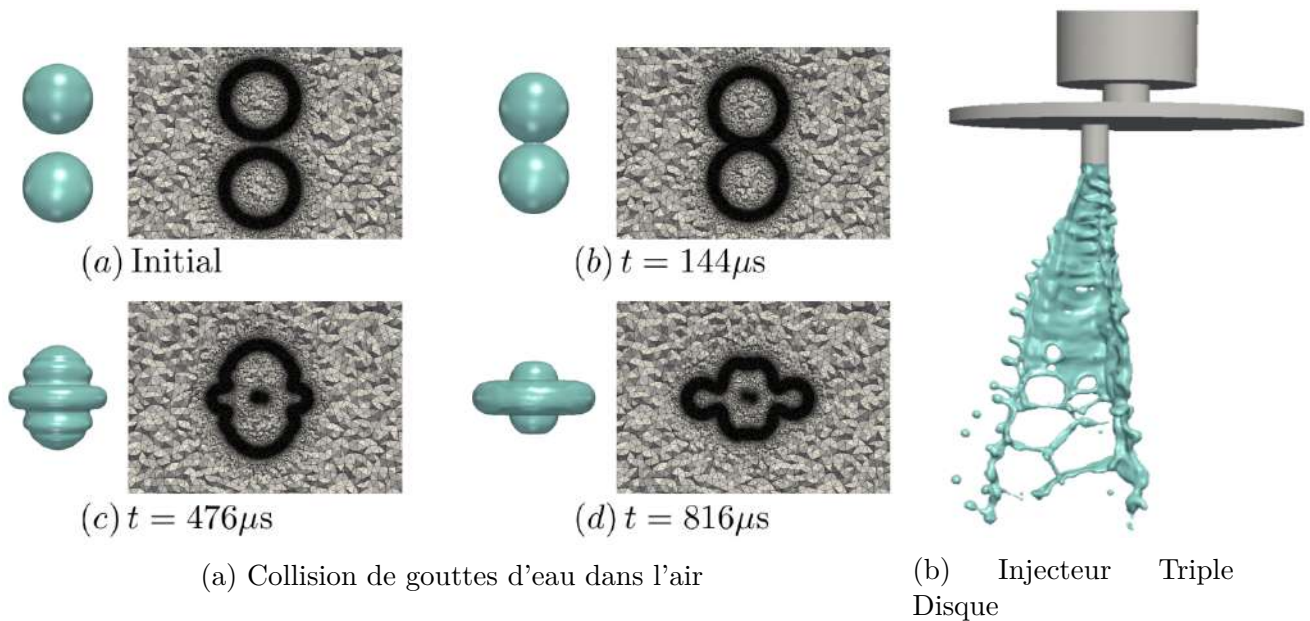


FIGURE 1.31 – Collision de gouttes d'eau dans l'air et simulation d'un injecteur triple disque obtenue par Janodet et al. (2020) en couplant la méthode GPMM avec une stratégie de raffinement de maillage dynamique.

La méthode Front-Tracking

Contrairement aux deux méthodes précédentes qui s'inscrivent dans un formalisme Eulerien, il existe également des stratégies basées sur une approche Lagrangienne pour suivre le comportement du liquide et de l'interface.

L'une des premières stratégies de ce type à avoir été proposée dans la littérature est la méthode "Marker-and-Cell" (MAC). Originellement introduite dans les années 1960 par Harlow & Welch (1965) et Welch et al. (1965) pour simuler des écoulements à surface libre incompressibles et visqueux, la méthode MAC utilise des marqueurs Lagrangiens sans masse pour repérer les cellules contenant le fluide d'intérêt. La Figure 1.32 explicite la situation considérée. Dans sa version originale, les cellules possédant un marqueur mais ayant au moins une cellule voisine sans marqueur se voit décerner le label de cellule d'interface. Cette stratégie permet de les trai-

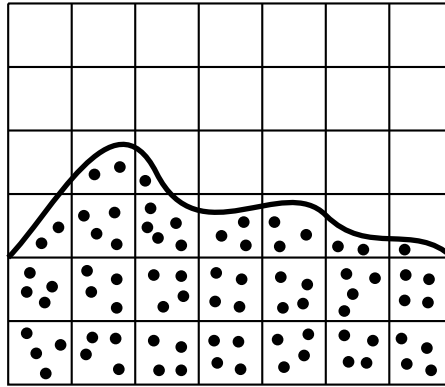


FIGURE 1.32 – Schéma de principe de la méthode MAC

ter différemment pour la prise en compte des flux de masse et de chaleur à travers l'interface ainsi que de la force de tension de surface. La position exacte de l'interface dans ces cellules n'est, malheureusement, pas connue ce qui engendre de nombreuses erreurs d'estimation des termes d'interface. Le transport des marqueurs dans l'écoulement peut également perturber leur distribution dans le fluide d'intérêt. En effet, en déplaçant certains marqueurs vers des zones de concentration préférentielle, des régions du fluide peuvent se retrouver dépourvues d'un nombre suffisant de marqueurs dégradant encore plus l'estimation de la position de l'interface et donc de sa dynamique. Cette méthode a ensuite été améliorée au fil du temps. Ces améliorations se sont tout d'abord concentrées sur la simplification de la stratégie de détermination de la pression, particulièrement complexe dans la méthode précédente, pour donner la méthode Simplified MAC (SMAC) de Amsden & Harlow (1970). Puis, elles se sont portées sur la description de l'interface pour aboutir à la méthode General domain SMAC (GENSMAC) présentée par Tomé & McKee (1994). Cette dernière ajoute des marqueurs spécifiques pour délimiter l'interface ce qui permet une évaluation beaucoup plus précise de sa courbure locale et ainsi de l'intensité de la force de tension de surface. Elle a par la suite été étendue aux écoulements axisymétriques par Tomé et al. (2000), à l'utilisation de pas de temps implicites par Oishi et al. (2004), à la prise en compte efficace de la tension de surface par Mangiavacchi et al. (2005), et, à la modélisation d'écoulement 3D par De Sousa et al. (2004). Le lecteur intéressé pourra se référer à l'article de review de McKee et al. (2008) pour plus de détails sur la méthode MAC et ses extensions. Bien que limitée au traitement de problèmes à surface libre, cette approche permet d'obtenir des résultats prometteurs pour simuler par exemple l'impact d'une goutte avec un liquide plus dense et plus visqueux illustré en Figure 1.33.

Une autre stratégie consiste à représenter l'interface à l'aide d'une chaîne de marqueurs Lagrangiens liés entre eux par une loi d'interpolation linéaire ou polynomiale (Figure 1.34). Le transport de ces marqueurs dans l'écoulement permet de connaître précisément la position de l'interface. Cette méthode a été conceptualisée dès les années 1960 par Richtmyer & Morton (1967) pour suivre des discontinuités dans les écoulements puis, utilisée par Daly (1969) pour étudier l'évolution d'une instabilité de Rayleigh-Taylor entre deux fluides visqueux incompressibles. Il a fallu pourtant attendre les travaux de Glimm et al. (1981) pour voir émerger son utilisation. Une fois les marqueurs advectés dans l'écoulement, la méthode de Glimm et al. (1981) propose de reconstruire l'interface en interpolant la ligne en 2D, ou le plan en 3D, formé par les marqueurs sur le maillage Eulerien. La position et la topologie de l'interface sont ensuite utilisées pour évaluer les propriétés de l'écoulement et résoudre les équations de Navier-Stokes.

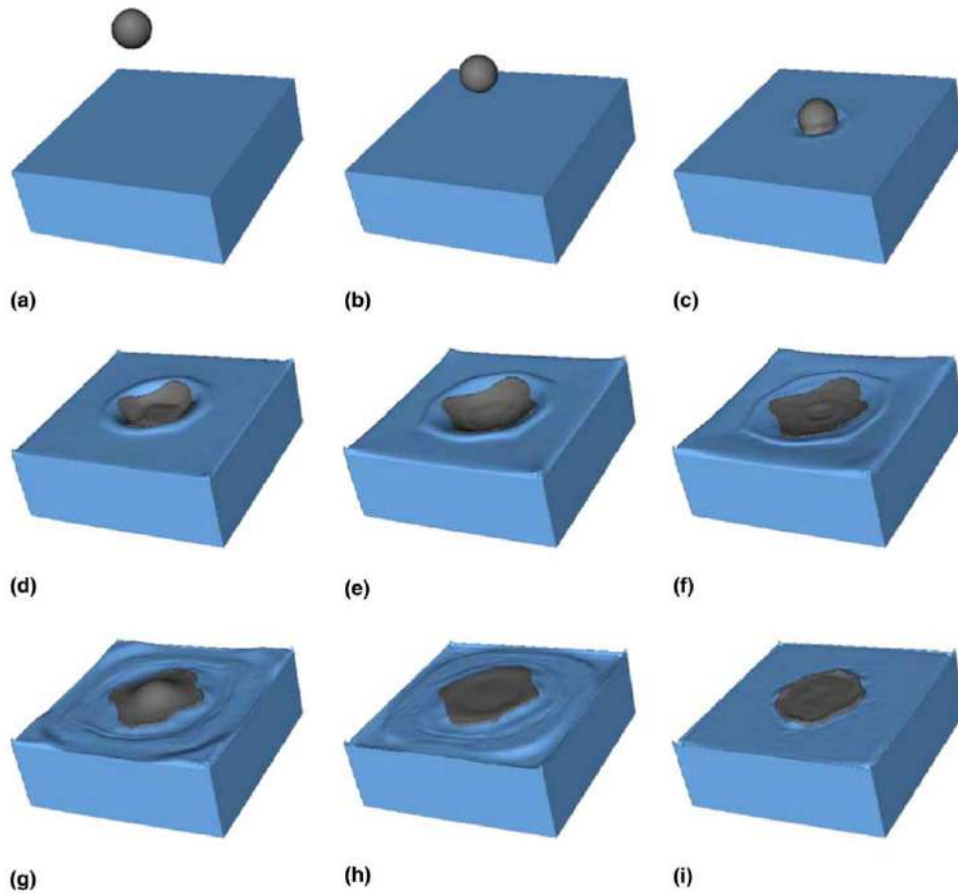


FIGURE 1.33 – Impact d’une goutte sur un film liquide par la méthode Front-Tracking GENSMAC-3D de De Sousa et al. (2004).

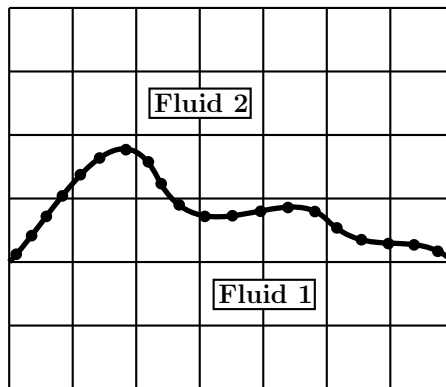


FIGURE 1.34 – Schéma de principe de la méthode Front Tracking

Cette méthode a par la suite été spécifiquement adaptée à la simulation des problèmes diphasiques par Unverdi & Tryggvason (1992). Le principal avantage de cette approche est qu’elle offre une connaissance très précise de la position de l’interface. Elle présente toutefois deux difficultés majeures. Tout d’abord, le transport des marqueurs dans l’écoulement ne garantit pas une conservation stricte de la masse dans chaque phase. Chaque marqueur étant advecté indépendamment, les erreurs numériques relatives au transport des marqueurs s’additionnent

ce qui peut conduire lors de la reconstruction de l'interface à une variation de la masse contenue dans chaque phase. En outre, les évolutions topologiques de l'interface dues au transport peuvent augmenter localement l'écart entre les différents marqueurs dégradant la représentation de l'interface dans les zones fortement déformées. Cet inconvénient nécessite de réensemencer régulièrement l'interface au cours du calcul pour y enlever ou y ajouter des marqueurs. Ceci contraint au développement d'une structure de données à la fois flexible et complexe où les marqueurs peuvent être intégrés ou supprimés facilement et les liens entre eux mis à jour rapidement. Pour faire face à ces difficultés, la formulation de Unverdi & Tryggvason (1992) a été améliorée au fil du temps avec, par exemple, les travaux de Tryggvason et al. (2001) qui ont proposé une méthode robuste de manipulation des marqueurs de l'interface ainsi qu'une manière d'évaluer plus précisément la force de tension de surface. Initialement développée dans un formalisme incompressible, la méthode a également été étendue à la simulation compressible par Terashima & Tryggvason (2009). Bien que son degré de maturité ne soit pas aussi poussé que celui des méthodes Volume-Of-Fluid ou Level-Set, l'approche Front-Tracking a déjà été utilisée avec succès pour simuler diverses configurations académiques incompressibles et compressibles. A titre d'exemple, la Figure 1.35a montre les résultats de la simulation de l'ébullition d'un film liquide sur un cylindre horizontal obtenus par Tryggvason et al. (2006) tandis que la Figure 1.35b permet d'observer la simulation d'un jet liquide en présence d'un faible rapport de masse volumique calculée par Tryggvason et al. (2011).

1.7.2 Les méthodes aux interfaces diffuses

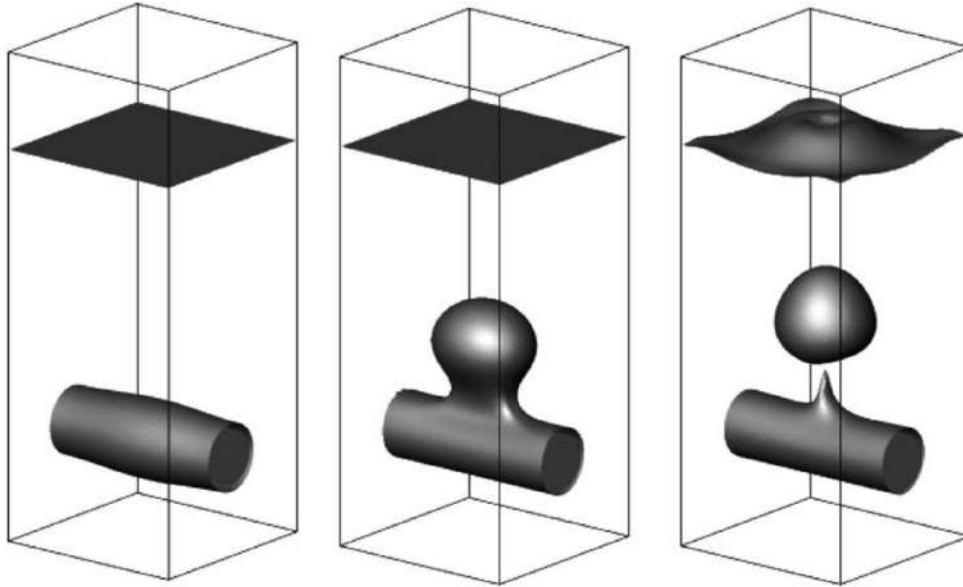
Contrairement aux méthodes aux interfaces raides pour lesquelles l'interface est modélisée par une discontinuité, les méthodes aux interfaces diffuses proposent de décrire l'interface comme une zone d'épaisseur finie à travers laquelle les variables de l'écoulement évoluent rapidement mais de façon continue. Ce type d'approche peut être divisée en deux familles : les méthodes "phase fields" et les méthodes multifluides. Ces deux familles se différencient par la description de la zone diffuse. La première famille justifie la diffusion par des considérations physiques et l'intègre ainsi intrinsèquement dans la formulation des équations. La seconde famille décrit l'interface comme une région hétérogène où les deux phases coexistent localement. La diffusion de l'interface résulte alors d'une diffusion numérique des variables qui décrivent l'interface mais, celle-ci est toujours considérée comme raide physiquement. Cette dernière famille nécessite donc des méthodes numériques particulières pour éviter une diffusion excessive et non-physique de l'interface.

Les méthodes Phase field

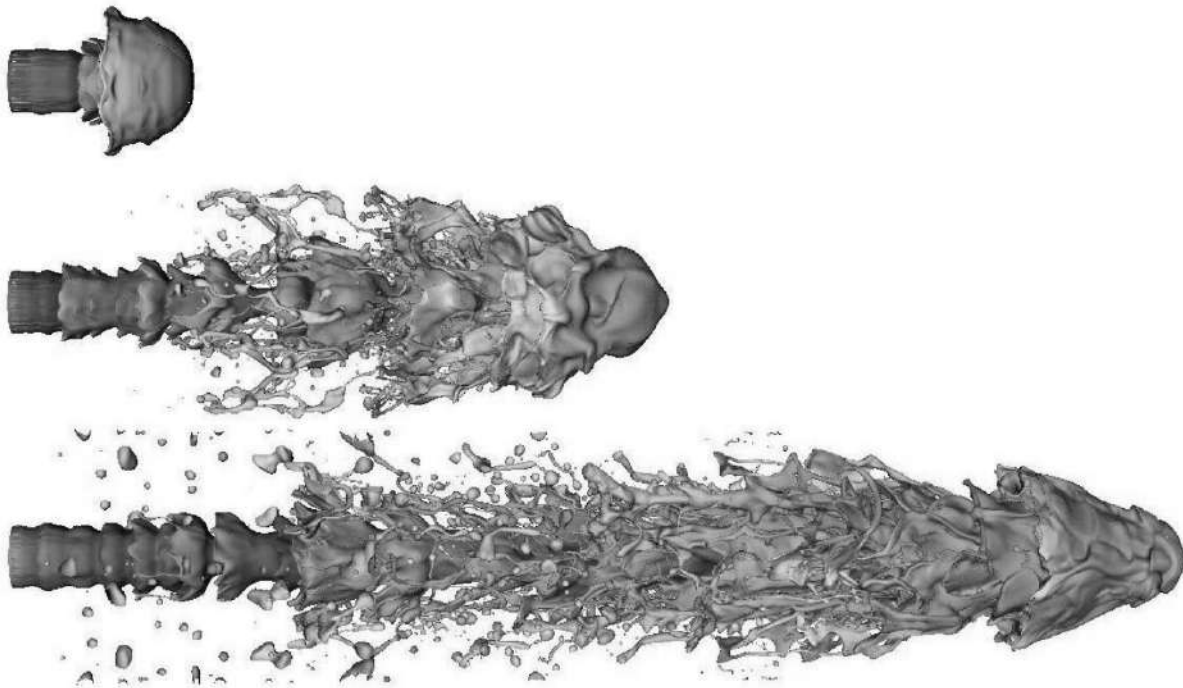
Les méthodes dites "phase fields" se basent sur la théorie de Gibbs (1878) et Van Der Waals (1891) selon laquelle la tension de surface est une manifestation macroscopique d'une accumulation d'énergie au niveau de l'interface. L'énergie libre F dans le domaine est alors définie comme la somme d'une contribution homogène et d'une contribution liée à la présence de l'interface. L'énergie libre totale F d'un système non-homogène dans un domaine Ω s'écrit alors :

$$F = \int_{\Omega} \left[f_0(\xi, \Phi) + \frac{\lambda}{2} (\nabla \Phi)^2 \right] dV \quad (1.84)$$

où Φ est une variable physique ou non qui sert à repérer l'interface. Appelée variable "phase field" ou paramètre d'ordre, elle prend une valeur différente dans chaque phase et varie de façon



(a) Evolution d'une interface liquide/vapeur lors de la génération d'une bulle de vapeur due à l'ébullition d'un film liquide disposé sur un cylindre horizontal par Tryggvason et al. (2006)



(b) Evolution de l'interface lors du développement d'un jet liquide 3D à faible rapport de masse volumique (10) et des nombres de Reynolds de 2030 et de Weber de 2200 par Tryggvason et al. (2011)

FIGURE 1.35 – Exemples d'application de la méthode Front-Tracking

continue d'une valeur vers l'autre à travers l'interface. Il convient de noter que la définition de la variable Φ est très similaire à celle d'une fonction Level-Set. Il faut cependant remarquer que, contrairement à la fonction Level-Set qui est utilisée comme un outil mathématique pour

suivre l'interface, le paramètre d'ordre Φ est directement utilisé pour enrichir la représentation thermodynamique du système fluide dans l'interface. Le terme f_0 , dans l'équation (1.84) correspond à la densité d'énergie libre du système homogène. Elle dépend du paramètre d'ordre Φ et, éventuellement, d'un jeu ξ d'autres variables comme la température. Il existe de nombreuses expressions dans la littérature et, le lecteur intéressé pourra par exemple se référer à la thèse de Nayigizente (2021) qui en liste certaines. La densité d'énergie liée à l'excès d'énergie libre est représentée par le terme $\frac{\lambda}{2} (\nabla\Phi)^2$. Basé sur le gradient de la variable Φ , ce terme est nul partout dans le domaine sauf à travers l'interface et son niveau est donné par le coefficient de capillarité λ . Cette densité d'énergie est, par ailleurs, directement reliée au coefficient de tension de surface σ via son intégration dans la direction normale à l'interface. En considérant deux positions \vec{x}_1 et \vec{x}_2 de part et d'autre d'une interface de normale \vec{n} , le coefficient de tension de surface s'écrit alors (Van Der Waals 1893) :

$$\sigma = \int_{\vec{x}_1}^{\vec{x}_2} \lambda (\nabla\Phi)^2 \vec{n} \cdot d\vec{x} \quad (1.85)$$

Dans le cas d'un système constitué de deux états homogènes, Gibbs (1878) a montré que la courbe d'évolution de la densité d'énergie libre f_0 en fonction de la variable Φ présente deux minima locaux appartenant à une même ligne tangente à la courbe. Une courbe d'évolution typique est donnée en Figure (1.36). Gibbs (1878) note également que le système est à l'équilibre

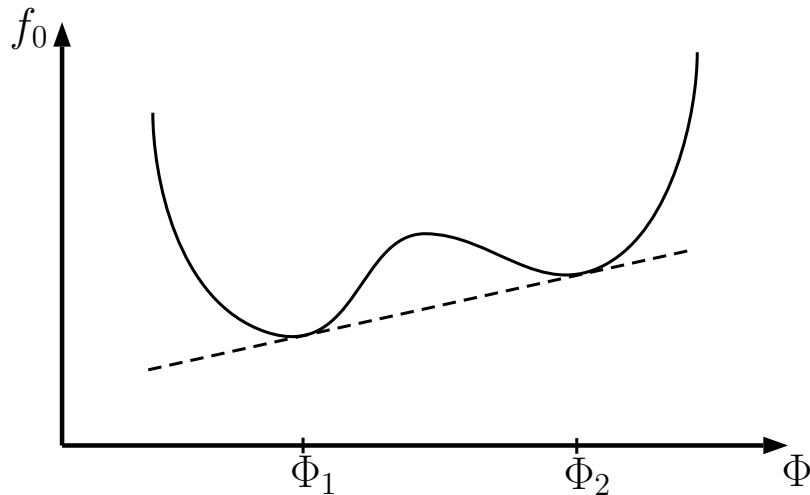


FIGURE 1.36 – Variation de la densité d'énergie f_0 en fonction du paramètre d'ordre Φ dans un système homogène constitué de deux phases

si l'énergie libre totale dans le domaine est minimum, c'est-à-dire si $\Phi = \Phi_1$ dans la phase 1 et $\Phi = \Phi_2$ dans la phase 2.

$$F(\Phi_{eq}) = \min_{\Phi} F(\Phi) \quad (1.86)$$

Dans ces conditions, Cahn & Hilliard (1958), Modica (1987) ou encore Elliott (1989) ont montré que le terme $\frac{\lambda}{2} (\nabla\Phi)^2$ permet un passage continu de $\Phi = \Phi_1$ à $\Phi = \Phi_2$ créant ainsi une représentation diffuse de l'interface. L'épaisseur de l'interface est alors contrôlée par la valeur du coefficient λ ainsi que par l'expression choisie pour la densité d'énergie f_0 . Cette propriété est particulièrement intéressante car elle permet de justifier physiquement la représentation de l'interface par une zone diffuse. Cependant, l'épaisseur typique d'interface obtenue en condition

sous-critique étant de l'ordre de 10^{-9} m à 10^{-7} m, sa résolution par un maillage est susceptible d'engendrer un coût de calcul inaccessible avec les moyens actuels pour les cas complexes, ce qui a durant longtemps constitué une importante limitation à l'utilisation de cette méthode. Ceci a motivé le développement de techniques pour épaissir l'interface sans en modifier les propriétés, par Jamet (1998) et Jamet et al. (2001) puis plus récemment par Nayigizente et al. (2018), ce qui permet de répondre en partie à ce problème.

A la manière des méthodes VOF ou Level-Set, l'évolution temporelle de l'interface est décrite par une équation d'advection. Il existe différentes formulations pour cette équation. La forme la plus utilisée est celle proposée par Cahn (1961) et Cahn & Hilliard (1971). Dérivée en basant le paramètre d'ordre Φ sur la concentration d'un fluide dans le cas d'un mélange constitué de deux fluides non-miscibles, l'équation d'évolution de Φ a été établie en imposant sa conservation locale :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M_{CH} \nabla \left(\left(\frac{\partial f_0}{\partial \Phi} \right)_\xi - \nabla \cdot (\alpha \nabla \Phi) \right) \right] \quad (1.87)$$

où M_{CH} est un paramètre appelé coefficient de mobilité du fluide ou coefficient d'Onsager généralisé. Il est analogue à un coefficient de diffusion et caractérise la relation de proportionnalité entre la vitesse d'une interface et la variation d'énergie libre (Christian 2002). Une autre forme également très connue est l'équation proposée par Allen & Cahn (1979).

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -M_{AC} \left[\left(\frac{\partial f_0}{\partial \Phi} \right)_\xi - \nabla \cdot (\alpha \nabla \Phi) \right] \quad (1.88)$$

où M_{AC} est un coefficient lié à la vitesse de déplacement de l'interface (voir Allen & Cahn (1979)). Initialement développée pour résoudre des problèmes de cristallisation, son utilisation a été étendue à une plus grande variété de problèmes et, en particulier, à des problèmes hydrodynamiques par Jeong & Kim (2017). Contrairement à l'équation (1.87), la formulation de Allen & Cahn (1979) présente l'avantage de ne pas faire apparaître de dérivée de quatrième ordre facilitant ainsi sa résolution numérique. En revanche, elle n'assure pas une conservation exacte du paramètre d'ordre au cours du temps. Nayigizente (2021) indique cependant qu'il n'existe pas un avantage clair à l'utilisation d'une formulation plutôt qu'une autre. Le choix doit donc dépendre de la physique étudiée, des méthodes numériques accessibles et, de la nature du paramètre d'ordre Φ considéré avec, en particulier, la nécessité d'assurer sa conservation ou non.

L'équation (1.84) couplée à l'une des équations de transport (eq. (1.87) ou eq. (1.88)) constitue la base de l'approche "Phase Fields". Ce couple de relations peut ensuite être intégré à différents systèmes d'équations permettant d'étudier des phénomènes physiques très divers comme, par exemple, la croissance de cristaux (Wheeler et al. 1993a), la propagation de fissures (Karma & Kessler 2001) ou même pour traiter des images (Beneš et al. 2004). L'utilisation de la méthode "Phase Field" pour traiter des phénomènes hydrodynamiques remonte à la dérivation du modèle "H" par Hohenberg & Halperin (1977) dédié aux écoulements incompressibles. Ce modèle a, par la suite, subi plusieurs modifications en fonction des hypothèses retenues concernant l'écoulement. Il a, en particulier, été étendu aux écoulements compressibles notamment par Wheeler et al. (1993b). Le modèle "Phase Field" dérivé par Wheeler et al. (1993b) consiste à ajouter des termes dans les équations de Navier-Stokes, décrites dans la partie 1.6.1, afin de prendre en compte la modification de l'énergie libre dans le système. Le système d'équations

obtenu se formule :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.89a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P \bar{I}) = \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}} - \bar{\bar{\tau}}^\Phi) \quad (1.89b)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \vec{u}) = \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}} \cdot \vec{u} - \bar{\bar{\tau}}^\Phi \cdot \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q} - \nabla \cdot \vec{j}^\Phi \quad (1.89c)$$

Le jeu d'équations (1.89) est complété par une équation pour résoudre le transport du paramètre d'ordre Φ . Sa forme dépend du modèle d'évolution temporelle choisi (Cahn & Hilliard (1971) ou Allen & Cahn (1979)) :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \Phi = \begin{cases} \nabla \cdot [M_{CH} \nabla ((\frac{\partial f_0}{\partial \Phi})_T - \nabla \cdot (\alpha \nabla \Phi))] \\ \text{ou} \\ -M_{AC} [(\frac{\partial f_0}{\partial \Phi})_T - \nabla \cdot (\alpha \nabla \Phi)] \end{cases} \quad (1.90)$$

Les termes $\bar{\bar{\tau}}^\Phi$ et \vec{j}^Φ dans les relations (1.89b) et (1.89c) correspondent à la modification du tenseur des contraintes et du flux liés à l'utilisation de l'approche "Phase Fields". $\bar{\bar{\tau}}^\Phi$ est donné par la relation suivante :

$$\bar{\bar{\tau}}^\Phi = \lambda \left(\nabla \Phi \otimes \nabla \Phi - \frac{1}{2} (\nabla \Phi)^2 \bar{I} \right) \quad (1.91)$$

Le flux \vec{j}^Φ dépend quant à lui du modèle d'évolution temporelle (Cahn & Hilliard (1971) ou Allen & Cahn (1979)). Il est donné par l'équation suivante :

$$\vec{j}^\Phi = \begin{cases} M_{CH} [(\frac{\partial f_0}{\partial \Phi})_T - \nabla \cdot (\lambda \nabla \Phi)] \nabla [(\frac{\partial f_0}{\partial \Phi})_T - \nabla \cdot (\lambda \nabla \Phi)] \\ M_{AC} [(\frac{\partial f_0}{\partial \Phi})_T - \nabla \cdot (\lambda \nabla \Phi)] \nabla (\lambda \Phi) \end{cases} \quad (1.92)$$

Il existe de nombreuses études théoriques portant sur les propriétés physiques et mathématiques des équations mais, à la connaissance de l'auteur, les simulations numériques de phénomènes hydrodynamiques sont encore très limitées. Il convient toutefois de souligner les résultats encourageants obtenus par certains auteurs comme Chiu & Lin (2011) et très récemment par Nayigizente (2021). Les premiers ont réussi à simuler l'impact d'une goutte d'eau sur un film liquide dans un contexte incompressible. Les résultats obtenus, visualisables en Figure 1.37, sont en bon accord qualitatif et quantitatif avec les expériences. Le second a utilisé une approche "phase field" compressible pour simuler l'impact entre deux gouttes d'oxygène liquide. L'utilisation avec succès de sa méthode d'épaississement d'interface TIM est très prometteuse pour la suite car, elle permet d'augmenter la résolution de maillage nécessaire à la discrétisation de l'interface. Ceci diminue le coût de calcul de la méthode "Phase Field" permettant d'envisager son utilisation future pour simuler des cas plus complexes.

Bien que les méthodes "Phase Fields" fournissent une approche intéressante pour simuler les écoulements multiphasiques, il reste encore des obstacles à franchir avant de pouvoir envisager leur utilisation dans des cas complexes. Ces obstacles sont aussi bien d'ordre numérique avec par exemple la résolution du système d'équations (1.89), dont la nature mathématique ne permet pas d'avoir recours aux méthodes numériques classiquement utilisées en mécanique des fluides, que d'ordre physique où la définition de la vitesse du son dans la zone d'interface pose encore des questions.

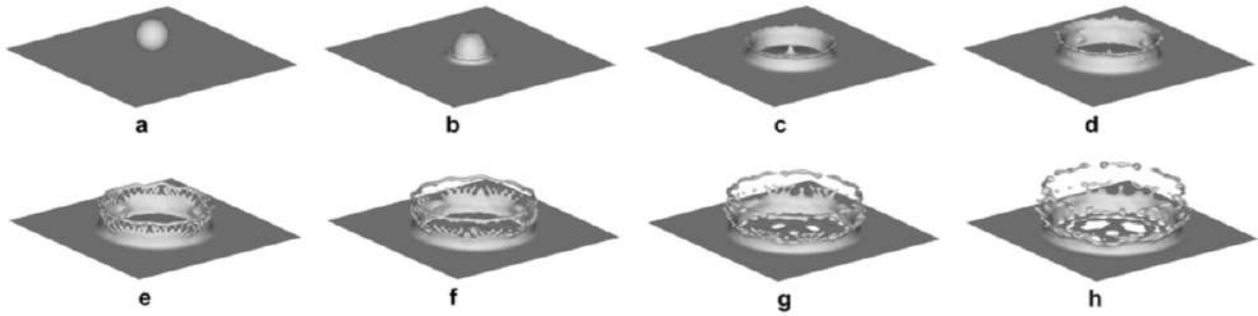


FIGURE 1.37 – Simulation de l'impact d'une goutte d'eau sur un film d'eau liquide avec une méthode Phase-field par Chiu & Lin (2011)

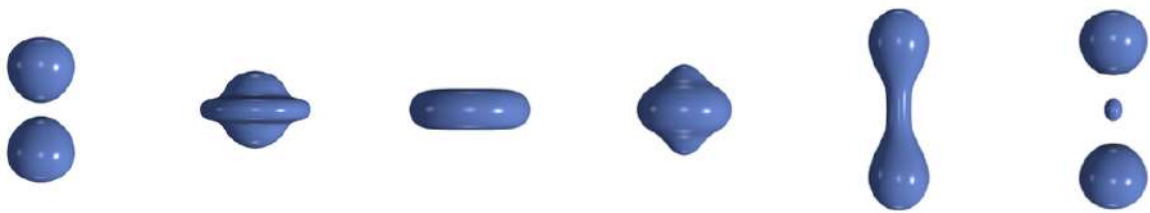


FIGURE 1.38 – Simulation de la collision de deux gouttes d'oxygène liquide à $We = 46$ avec la méthode d'épaississement TIM développée par Nayigizente et al. (2018). L'image est issue de Nayigizente (2021).

Méthodes multifluides

La méthode multifluides a fait son apparition au début des années 1970 à travers les travaux de Drew & Segel (1971) dans le but initial de simuler la déflagration et la détonation d'écoulements hétérogènes hautement réactifs dans des matériaux granulaires. Elle propose de décrire l'écoulement dans l'ensemble des fluides par un système unique d'équations de conservation et de modéliser l'interface par une zone où les différents fluides coexistent localement et où les grandeurs de l'écoulement varient fortement mais sans discontinuer. Contrairement à l'approche Phase Field, l'épaisseur de la zone d'interface n'est pas dictée par des considérations physiques mais résulte d'une diffusion numérique liée à la capacité du schéma numérique employé à gérer des forts gradients et à les conserver au cours du temps. Ce type d'approche s'appuie sur un système d'équations ainsi que sur une fermeture thermodynamique capable de décrire le comportement des différents fluides en présence. L'un des premiers systèmes d'équations à être apparu est le modèle à 7 équations de Baer & Nunziato (1986). Initialement développé pour étudier des problèmes de transition de la déflagration vers la détonation (DDT) dans les matériaux granulaires, il fut par la suite étendu par Saurel & Abgrall (1999) pour traiter des écoulements avec deux phases séparées. Constitué d'une équation de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie dans chacune des phases et d'une équation de transport de la fraction volumique d'une des deux phases, il se présente comme le modèle le plus complet et permet de décrire l'écoulement de deux phases en déséquilibre de vitesse, pression, température et potentiel chimique. Différents sous modèles ont ensuite vu le jour réduisant le

nombre d'équations du système à l'aide d'hypothèses sur la nature de l'écoulement dans l'interface. Kapila et al. (2001) et Saurel et al. (2009) proposent ainsi des modèles à 5 équations en supposant l'équilibre mécanique entre les deux phases. Saurel et al. (2016) ont également dérivé un modèle à 4 équations en imposant un équilibre mécanique et thermique entre les deux fluides. Les modèles à 7, 5 et 4 équations, de même que leurs hypothèses, seront détaillés dans le chapitre 4.

L'utilisation d'un même système d'équations pour décrire l'écoulement dans tout le domaine de calcul fournit un grand avantage à cette méthode. Elle permet, en effet, une modélisation native de l'interface par une zone de fort gradient ainsi qu'une prise en compte des échanges entre les phases et des forces qui y agissent grâce au simple ajout de termes sources dans le système d'équations. N'étant pas contrôlée par des considérations physiques, l'épaisseur de l'interface peut cependant augmenter au cours du temps sous l'effet de la diffusion numérique et conduire à une dynamique non-physique de l'écoulement. L'utilisation de schémas numériques capables de transporter de forts gradients comme les schémas de Godunov (1959) permet cependant de corriger en grande partie ce défaut. Récemment, une méthode permettant de conserver l'épaisseur de l'interface au cours du temps grâce à l'ajout de termes de raidissement dans les équations a également été proposée par Jain et al. (2020).

La méthode multifluides est aujourd'hui employée pour simuler une grande variété d'écoulements diphasiques dans un contexte compressible. A titre d'exemple, elle fut appliquée par Le Martelot et al. (2014) pour calculer des phénomènes d'ébullition (Figure 1.39), par Chiapolino et al. (2017) pour simuler un jet liquide subsonique (Figure 1.40) ou encore par Hejazialhosseini et al. (2013) pour reproduire le comportement d'une bulle impactée par une onde de choc (Figure 1.41).

La méthode multifluides sera détaillée plus en profondeur dans le chapitre 4. Ses avantages et limitations y seront également plus amplement discutés.

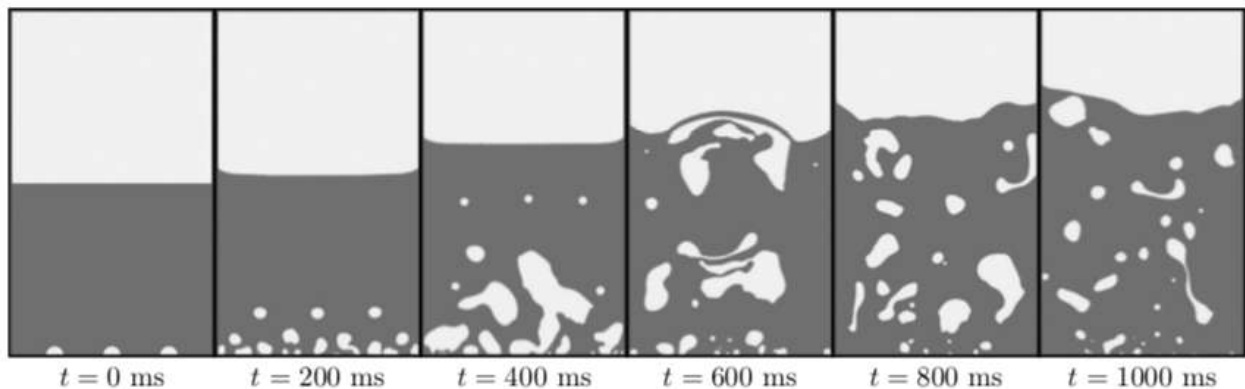


FIGURE 1.39 – Simulation de l'ébullition d'eau liquide réalisée à l'aide d'une méthode multifluides par Le Martelot et al. (2014).

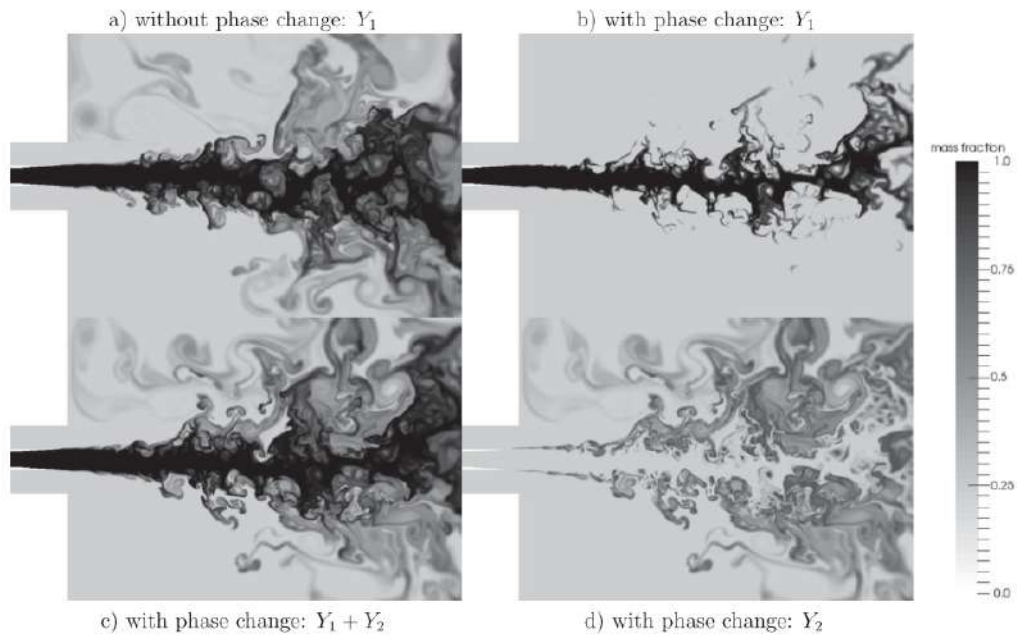


FIGURE 1.40 – Simulation par une méthode multifluides de la fragmentation d’un jet d’oxygène liquide subsonique par un écoulement coaxial d’azote sous forme gazeuse issue de Chiapolino et al. (2017).

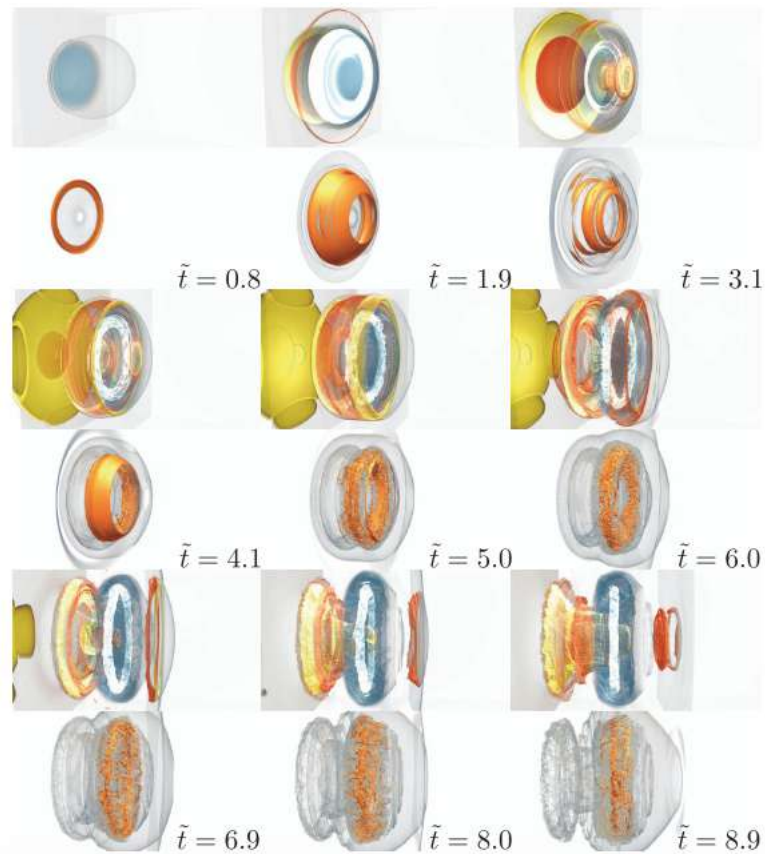


FIGURE 1.41 – Simulation 3D de l’interaction entre en choc et une bulle avec un modèle multifluides à 4 équations réalisée par Hejazialhosseini et al. (2013).

1.8 Objectifs de la thèse et structure du manuscrit

La conception de moteurs compatibles avec des normes environnementales de plus en plus exigeantes nécessite une compréhension toujours plus fine de leur fonctionnement et des phénomènes physiques qui y sont associés. La simulation numérique se présente alors comme un outil précieux qui permet un accès direct à des informations locales parfois difficiles à obtenir expérimentalement. Ceci est particulièrement vrai pour les injecteurs dont la petite taille rend l'instrumentation ardue et coûteuse. Excepté dans quelques études académiques, les injecteurs industriels ne sont donc caractérisés qu'à travers le spray qu'ils génèrent et la dynamique menant à sa formation reste bien souvent mal comprise.

Cette thèse a donc pour objectif d'étudier les phénomènes physiques en jeu dans les injecteurs de type Airblast avec préfilmeur et de développer des outils numériques pour permettre leur caractérisation. Les travaux ont été réalisés au sein du Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) et ont été financés par l'entreprise Safran Aircraft Engines dans le cadre d'un contrat CIFRE.

Le manuscrit est construit de la façon suivante :

- Le chapitre 2 est dédié à l'étude de la dynamique du film liquide et du processus d'atomisation primaire dans des configurations d'injecteurs de type Airblast avec préfilmeur. Une méthode permettant de réaliser des simulations numériques directes de configurations académiques est d'abord développée. Puis, cette dernière est appliquée au calcul de deux configurations différentes à l'aide d'une méthode Volume-Of-Fluid (VOF) et du solveur incompressible NGA. Les travaux présentés dans ce chapitre ont donné lieu à une collaboration avec Olivier Desjardins, professeur à Cornell University (Etats-Unis) et font l'objet d'une publication dans un journal scientifique.
- Le chapitre 3 expose le développement d'une méthodologie alternative moins coûteuse que celle présentée précédemment pour la prédiction de l'atomisation primaire d'un film liquide en bout de préfilmeur. Basée sur un ensemble de modèles phénoménologiques, cette approche est implémentée dans un formalisme Lagrangien au code compressible AVBP. Elle est ensuite appliquée sur une configuration industrielle d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.
- Pour pallier les limitations de validité de l'approche phénoménologique, le chapitre 4 propose de développer une méthode multfluides aux interfaces diffuses dans le code compressible AVBP. Un schéma numérique de Godunov (1959) est également développé pour éviter la diffusion numérique des forts gradients à l'interface liquide/gaz. Après une validation sur des cas 1D et 2D, la méthode est finalement appliquée pour simuler des cas 2D de film liquide cisailé et d'atomisation Airblast avec préfilmeur.

Chapitre 2

Simulation numérique haute fidélité de configurations académiques d'atomisation de type Airblast avec préfilmeur

2.1 Introduction : Atomisation de type Airblast avec préfilmeur et simulation numérique directe

La simulation numérique directe des phénomènes d'atomisation est un outil précieux pour comprendre finement les phénomènes physiques liés à l'atomisation et par la suite améliorer la conception des injecteurs. Cependant, comme évoqué dans le chapitre précédent, ce type de simulation pose des difficultés. Tout d'abord, les discontinuités de masse volumique et de viscosité à l'interface liquide/gaz ainsi que la prise en compte de la force surfacique liée à la tension de surface nécessite l'utilisation de méthodes numériques spécifiques. Ensuite, les tailles caractéristiques de l'atomisation ainsi que la bonne discrétisation de l'interface impliquent l'utilisation d'une résolution spatiale très fine ce qui engendre des coûts de calcul très élevés, voire irréalistes.

Malgré ces limitations, la croissance des capacités de calcul ainsi que le développement de méthodes numériques robustes permettent maintenant de réaliser des simulations directes de processus d'atomisation sur des cas académiques. La simulation numérique des processus d'atomisation assisté par air, où une nappe liquide est cisailée de chaque côté par un écoulement gazeux à haute vitesse, est ainsi le sujet de plusieurs études depuis quelques années. Ce genre d'étude a par exemple été réalisée par Pringuey & Steward Cant (2014) pour démontrer la capacité de sa méthode numérique Robust Conservative Level Set (RCLS) à simuler correctement des écoulements diphasiques complexes. Les auteurs ont montré dans cette étude la faculté du code à prédire le régime et la longueur d'atomisation en bon accord avec des résultats expérimentaux et des projections théoriques. Sander (2008) a également conduit une simulation numérique directe de nappe liquide mais dans un environnement figé et en utilisant une méthode VOF. Le but de leur étude était d'identifier les paramètres responsables de la création d'instabilités en faisant varier la géométrie et les paramètres de l'écoulement liquide en entrée du domaine. Par la suite, la dynamique de battement d'un film liquide cisailé par

un écoulement à haute vitesse a été caractérisée par Odier et al. (2015) à l'aide d'une batterie de simulations 3D d'écoulements à rapports de masses volumiques et de vitesses modérés en utilisant une méthode Level Set.

Bien que la désintégration de nappe liquide soit l'un des phénomènes d'atomisation mise en évidence dans la littérature pour les injecteurs de type Airblast, l'accumulation de liquide au bord de la lèvre de l'injecteur est également un phénomène important. Or, il existe très peu d'études numériques traitant du processus d'atomisation par accumulation. De plus, du fait de la faible quantité de dispositifs expérimentaux existants, celles-ci se concentrent quasi-exclusivement sur la configuration de Geppert et al. (2012). Dans cette configuration expérimentale, présentée dans la partie 2.3, l'atomisation primaire en bord de lèvre et la formation du spray qui en découle ont été finement observées en faisant varier la vitesse du liquide et du gaz, les propriétés du liquide ou encore la géométrie. La désintégration du liquide a donc été précisément caractérisée au niveau du bord d'atomisation donnant accès à un large panel de résultats expérimentaux particulièrement intéressants pour valider les simulations numériques. La première simulation numérique de cette configuration a été réalisée par Warnckle et al. (2017) en utilisant l'approche *embedded direct numerical simulation* (eDNS) proposée par Sauer et al. (2014) et une méthode VOF intégrée dans le solveur OpenFoam. La méthode eDNS consiste à utiliser les données de l'écoulement d'un calcul LES gazeux, typiquement ici d'un canal turbulent, comme conditions aux limites d'entrée pour un calcul DNS de la zone d'atomisation. Un bon accord a globalement été trouvé avec les données expérimentales malgré la faible précision de localisation de l'interface avec la méthode VOF utilisée. Une étude récente de Warnckle et al. (2019) a cependant montré que la condition aux limites du gaz a une influence très importante sur le processus d'atomisation. Cette influence est due à la petite taille du domaine de calcul utilisée par Warnckle et al. (2017) et, en particulier, à la faible distance entre l'entrée du domaine et le bord d'atomisation. Il convient de noter que des conclusions similaires à celle de Warnckle et al. (2019) concernant l'influence de la taille du domaine de simulation ont également été obtenues par Strasser & Battaglia (2017) et Ling et al. (2019). En effet, les premiers auteurs ont mis en lumière l'influence de la longueur de préfilmeur sur les caractéristiques du spray issu de l'atomisation, tandis que les seconds ont démontré que la taille du domaine peut agir sur le développement des vagues d'instabilité à l'interface du film liquide. La simulation a également été réalisée par Mukundan et al. (2019) à l'aide de la même méthode eDNS mais en utilisant sa méthode de suivi d'interface appelée *coupled level set moment of fluid* (CLSMOF) et la méthode *coupled level set volume of fluid* (CLSVOF) proposée par Sussman & Puckett (2000). Les bonnes tendances sont retrouvées avec les deux méthodes mais les limitations dues à la petite taille du domaine de calcul sont également soulignées. Finalement, la configuration numérique de Warnckle et al. (2017) a été calculée par Wetherell et al. (2020) en utilisant une méthode CLSVOF couplée avec un raffinement de maillage adaptatif. Cette approche a permis de retrouver des résultats quantitatifs en accord avec ceux de Warnckle et al. (2017) tout en réduisant le coût du calcul.

Prenant en compte les limitations des études précédentes, ce chapitre propose dans un premier temps de réaliser une simulation haute fidélité de la configuration de Geppert et al. (2012). La simulation numérique est réalisée avec le code de calcul NGA (Desjardins, Blanquart, Barlarac & Pitsch 2008) capable de capturer précisément l'interface à l'aide d'une approche VOF augmentée par une méthode de reconstruction de l'interface *Piece Linear Interface Calculation*, PLIC (Youngs 1982). L'influence de la condition aux limites d'entrée sur le processus d'atomisation primaire est limitée par une augmentation de la taille du domaine de calcul par

rapport à celui de Warnckle et al. (2017). Une méthode d'adimensionnement est également proposée afin de limiter au maximum le coût du calcul. Cette approche est basée sur l'identification et la conservation de quatre nombres sans dimension de première importance pour la dynamique de l'écoulement du film liquide ainsi que les phénomènes d'accumulation et d'atomisation primaire. Il est montré qu'une modification des autres paramètres de l'écoulement permet d'obtenir une simulation haute fidélité de l'écoulement du film liquide et du processus d'atomisation primaire pour un coût de calcul acceptable. Grâce à cette méthode, un domaine de calcul d'environ $16 \times 16 \times 8$ mm a ainsi pu être simulé avec seulement 61 millions de cellules à comparer aux $6 \times 3 \times 4$ mm du domaine de Warnckle et al. (2017) et les 84.41 millions de cellules nécessaires pour simuler le même point de fonctionnement. Les résultats obtenus sont ensuite largement discutés et comparés aux données expérimentales. Cette partie contient tout d'abord une étude des instabilités à la surface du film liquide, puis, une caractérisation qualitative et quantitative du processus d'atomisation primaire. Ce calcul est l'objet de la publication Carmona et al. (2021) dont le contenu est présenté dans les parties 2.2 à 2.5.3. La section 2.6 propose d'appliquer la méthodologie développée à une configuration de marche. Les résultats sont qualitativement validés en regard de la littérature et comparés au processus d'atomisation observé dans la configuration de Gepperth et al. (2012).

2.2 Méthode numérique : le solveur NGA

Les simulations contenues ce chapitre ont été réalisées à l'aide du code de calcul NGA. NGA est un solveur numérique parallèle développé pour la simulation numérique direct (DNS) et la simulation aux grandes échelles (LES) des écoulements diphasiques complexes et turbulents. Il résout les équations de Navier-Stokes sur des maillages structurés dans un contexte incompressible et isotherme sans changement de phase, i.e. :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho = 0 \quad (2.1a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu [\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T]) \quad (2.1b)$$

Le jeu d'équations (2.1) est résolu dans les phases gazeuse et liquide où les propriétés physiques sont considérées comme constantes. En considérant une interface Γ , le saut de masse volumique et de viscosité à travers celle-ci est écrit comme $[\rho]_{\Gamma} = \rho_l - \rho_g$ et $[\mu]_{\Gamma} = \mu_l - \mu_g$. En l'absence de changement de phase, le champ de vitesse est continu dans la direction normale à l'interface. L'interface est assimilée à une paroi non-glissante ce qui amène à supposer que la vitesse tangentielle est également continue à travers l'interface. Ces deux conditions conduisent à ne pas considérer de saut de vitesse à travers l'interface $[\vec{u}]_{\Gamma} = \vec{0}$. La force de tension surface et les cisaillements visqueux normaux à l'interface engendrent, de plus, un saut de pression qui s'écrit :

$$[p]_{\Gamma} = \sigma \kappa + 2[\mu]_{\Gamma} \vec{n}^T \cdot \nabla \vec{u} \cdot \vec{n} \quad (2.2)$$

où σ est le coefficient de tension de surface considéré constant, κ fait référence à la courbure de l'interface et \vec{n} est le vecteur normal à l'interface. Ce jeu d'équation est résolu sur une configuration de maillage décalée (staggered grid) où les composantes de vitesse sont stockées aux faces alors que la pression et les autres scalaires sont stockés au centre de chaque cellule du maillage. Une formulation semi-implicite de second ordre de type de Crank-Nicolson similaire

à celle implémentée par Choi & Moin (1994) est utilisée pour la discrétisation temporelle. Les termes diffusifs sont résolus par un schéma centré de second ordre. Le suivi de l'interface est réalisé à l'aide d'une méthode Volume Of Fluid (VOF) où la fraction volumique locale de liquide est stockée dans chaque cellule. Le suivi de l'interface est amélioré par l'utilisation d'une méthode de reconstruction PLIC, pour Piecewise Linear Interface Calculation, qui approxime la position de l'interface dans chaque cellule par un plan orienté perpendiculairement à la normale à l'interface. Cette dernière est déterminée en utilisant la méthode ELVIRA proposée par Pilliod & Puckett (2004). Pour éviter les erreurs numériques, et ainsi l'apparition de courants parasites à l'interface, une fonction distance découplée du maillage est utilisée pour calculer sa courbure κ (Owkes & Desjardins 2015). Le champ de fraction volumique de liquide (VOF) est transporté à l'aide du schéma "3D unsplit" proposé par Owkes & Desjardins (2014) qui assure une conservation exacte de la masse. Enfin pour des raisons de stabilité, les équations de Navier-Stokes sont discrétisées dans leur forme conservative selon la stratégie de flux de quantité de mouvement détaillée dans Desjardins et al. (2013). Loin de l'interface, une discrétisation de second ordre des opérateurs permet un transport pleinement conservatif de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique (Desjardins, Blanquart, Balarac & Pitsch 2008).

2.3 Présentation de la configuration de Gepperth et al. (2012)

La configuration expérimentale a été conçue au Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) de l'université technologique de Karlsruhe (KIT) dans le but d'étudier les phénomènes d'écoulement de film et d'atomisation primaire dans des conditions de fonctionnement proches de celle des injecteurs aéronautiques de type Airblast. Présentée dans la Figure 2.1 (gauche), elle est constituée d'un préfilmeur en forme d'aile placé dans un canal avec un écoulement rapide d'air. L'air est fournie à l'installation par un compresseur radial avec un débit massique maximum de 200 g/s. Il passe ensuite dans un système composé d'un redresseur et d'une tuyère pour assurer un champ de vitesse homogène dans la section de test. Le liquide est injecté via 50 trous distribués de façon équidistante à la surface du préfilmeur. Le cisaillement gazeux engendre ensuite la création d'un film liquide homogène qui s'écoule le long du préfilmeur dans la direction x jusqu'à atteindre son bord où il est atomisé en gouttes. Le processus de formation des premières gouttes, appelé atomisation primaire, est étudié par une méthode d'ombroscopie. Une caméra ultra-rapide est placée perpendiculairement au plan (X,Z) de l'écoulement et le processus d'atomisation primaire est enregistré avec une fréquence de 7 kHz. Les papiers de Müller et al. (2006), Gepperth et al. (2010) et Gepperth et al. (2012), présentent les diagnostics optiques réalisés ainsi que les résultats expérimentaux obtenus. Un large panel de débits de gaz et de liquide a été étudié afin de déterminer l'influence de ces paramètres sur le processus d'atomisation primaire. Le Tableau 2.1 résume les différentes conditions expérimentales considérées dans cette thèse. Le débit volumique 2D Λ_l est déterminé à partir de la longueur du patch d'injection $b = 50$ mm, du débit de liquide injecté \dot{m}_l et de la masse volumique du liquide ρ_l par la formule :

$$\Lambda_l = \frac{\dot{m}_l}{\rho_l b} \quad (2.3)$$

Vitesse moyenne de l'air	\bar{U}_g	20 - 70 m.s ⁻¹
Température de l'air	T_g	298 K
Masse volumique de l'air	ρ_g	1.21 kg.m ⁻³
Viscosité dynamique de l'air	μ_g	1.815.10 ⁻⁵ kg.m ⁻¹ .s ⁻¹
Débit volumique 2D de liquide injecté	Λ_l	12.5 - 75 mm ² .s ⁻¹
Pression de fonctionnement	P	1.10 ⁵ Pa

TABLE 2.1 – Points de fonctionnement du banc expérimental du KIT considérés dans la thèse

La vitesse moyenne du gaz, appelée vitesse bulk, est calculée arbitrairement à l'endroit où la section est minimale. L'influence de la tension de surface est également examinée par l'utilisation de deux types de liquide : le Shellsol D70 dont les caractéristiques sont proches de celles du Kérosène et un mélange isovolume de 1,2-Propanediol et d'eau appelé 1 :1 W-P. Leurs caractéristiques physiques sont résumées dans le Tableau 2.2.

		Shellsol D70	1 :1 W-P
Masse volumique	ρ_l	770 kg.m ⁻³	1008 kg.m ⁻³
Viscosité dynamique	μ_l	1.56.10 ⁻³ kg.m ⁻¹ .s ⁻¹	6.06.10 ⁻³ kg.m ⁻¹ .s ⁻¹
Coefficient de tension de surface	σ_l	27.5.10 ⁻³ kg.s ⁻²	46.6.10 ⁻³ kg.s ⁻²
Température	T_l	298 K	298 K

TABLE 2.2 – Propriétés physiques des liquides considérés dans la thèse.

Dans la présente étude, nous nous concentrons sur un point de fonctionnement à pression et température ambiante avec une vitesse moyenne de gaz de 50 m/s et un débit volumique 2D de liquide de 50mm²/s. Ce débit correspond à une vitesse moyenne d'injection de liquide de 0.5 m/s. Le liquide utilisé est le Shellsol D70.

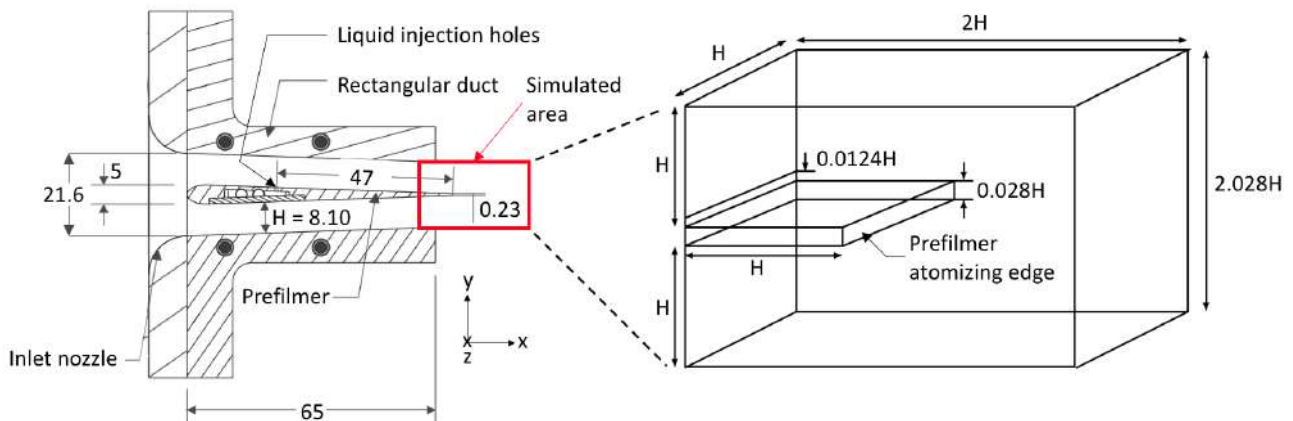


FIGURE 2.1 – Configuration expérimentale de Gepperth et al. (2012), à gauche (toutes les longueurs sont représentées en mm). Configuration numérique simplifiée, à droite. Le rectangle identifie la zone simulée dans la configuration expérimentale. La figure est adapté de Warnckle et al. (2017).

2.4 Stratégie numérique

L'enjeu majeur pour rendre possible la réalisation d'une simulation numérique directe de cette configuration est de garder un coût de calcul raisonnable. La simulation est donc réduite à la zone d'intérêt autour du bord d'atomisation. Le domaine numérique, présenté en Figure 2.1 (droite), est une boîte 3D de dimensions $2H \times 2.028H \times H$ où H est la hauteur du canal. Dans la Figure 2.1, le liquide et le gaz entrent par la gauche et sortent par la droite du domaine. Le haut et le bas du domaine sont traités par des conditions de mur non-glissant tandis que le domaine est périodique selon l'axe z . Le liquide est directement injecté sous la forme d'un film liquide de $0.0124H$ ($100 \mu\text{m}$) d'épaisseur ce qui correspond aux mesures expérimentales. Une distance H est conservée entre l'entrée du domaine et le bord du préfilmeur pour éviter toute influence de la condition d'entrée sur le processus d'atomisation primaire et ainsi que les instabilités de film et la turbulence du gaz à la surface du film soient pleinement développés avant d'atteindre le bord d'atomisation. Afin de représenter fidèlement le cas académique, le profil d'entrée du gaz est extrait d'une simulation LES purement gazeuse réalisée avec le code AVBP (Schönfeld & Rudgyard 1999) sur la configuration complète. Le profil moyen de vitesse y est extrait à une distance H avant le bord du préfilmeur. La hauteur du film $0.0124H$ étant négligeable devant celle du canal H , nous faisons l'hypothèse que le profil de vitesse n'est pas affecté par la présence du film. Ce profil est donc imposé en entrée pour la simulation DNS. Le film liquide est quant à lui injecté avec une vitesse uniforme de 0.5 m/s .

Malgré l'utilisation d'un domaine numérique simple, la simulation numérique haute fidélité de l'écoulement du film liquide et du processus d'atomisation primaire reste très coûteuse. Une stratégie basée sur une analyse de similarité est donc mise en place pour réduire encore le coût du calcul. Quatre nombres sans dimension ont ainsi été identifiés comme des paramètres de contrôle du processus d'atomisation. Ils sont compilés dans le Tableau 2.3. Les indices l et g

$M = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2}$	$We = \frac{\rho_g h_f (U_g - U_l)^2}{\sigma}$	$\frac{\mu_l}{\mu_g}$	$\frac{\rho_l}{\rho_g}$
---	--	-----------------------	-------------------------

TABLE 2.3 – Tableau des nombres sans-dimensions considérés.

sont utilisés pour décrire le liquide et le gaz. La masse volumique est ρ , U est la vitesse bulk de l'écoulement du fluide, μ est la viscosité dynamique et h_f est la hauteur du film liquide. Des études menées sur l'atomisation de film liquide (Lozano et al. 2005, Fernandez et al. 2009) et sur des configurations d'injecteur de type Airblast avec préfilmeur (Gosselin et al. 2017) ont montré que le rapport de flux de quantité de mouvement M est un paramètre déterminant pour l'atomisation primaire. Ce processus est également dépendant du rapport entre les forces d'inertie et de tension de surface matérialisé par le nombre de Weber We . Comme proposé par Gosselin et al. (2017) et Mukundan et al. (2019), ce nombre de Weber est basé sur la hauteur de film. Finalement, le rapport des viscosités dynamiques et des masses volumiques est conservé pour préserver les conditions de saut à travers l'interface. La simulation est résolue en paroi le long du préfilmeur ce qui implique de satisfaire $y^+ = 1$. Un lien entre le critère y^+ et les paramètres de l'écoulement gazeux est dérivé dans la partie suivante, puis ses implications pour la résolution du maillage sont discutés.

2.4.1 Lien entre le critère y^+ et les paramètres de l'écoulement gazeux

L'écoulement gazeux autour du préfilmeur peut être assimilé à un canal turbulent. De plus, la hauteur du film liquide étant très faible devant la hauteur du canal, elle peut être négligée. Le coefficient de frottement en paroi est ainsi défini comme le rapport entre les contraintes de cisaillement en paroi τ_w et l'énergie cinétique du gaz.

$$C_f = \frac{\tau_w}{\frac{1}{2}\rho_g U_g^2}, \quad (2.4)$$

où $\tau_w = \rho_g u_\tau^2$. La vitesse de frottement en paroi u_τ peut s'écrire comme suit,

$$u_\tau = U_g \sqrt{\frac{C_f}{2}}. \quad (2.5)$$

Dans son étude sur les canaux turbulents, Dean (1978) propose de relier le coefficient de frottement pariétal C_f aux grandeurs de l'écoulement gazeux par la relation (2.6),

$$C_f = \alpha (2Re_H)^{-0.25}, \quad (2.6)$$

où Re_H est le nombre de Reynolds basé sur la moitié de la hauteur du canal H et U_g est la vitesse bulk de l'écoulement gazeux,

$$Re_H = \frac{\rho_g U_g H}{\mu_g}. \quad (2.7)$$

Le coefficient α est établi à partir de résultats expérimentaux à 0.073. Tsukahara & Kawamura (2014) ont par la suite confirmé ce lien à partir d'une étude DNS et trouvent $\alpha = 0.066$. La valeur $\alpha \approx 0.07$ est choisie pour cette étude. La vitesse de frottement en paroi est donc reliée aux paramètres de l'écoulement en combinant les équations (2.5) et (2.6).

$$u_\tau = \sqrt{\alpha/2} (2Re_H)^{-1/8} U_g \quad (2.8)$$

$$\iff u_\tau = 2^{-5/8} \alpha^{1/2} Re_H^{-1/8} U_g \quad (2.9)$$

En introduisant le Reynolds de frottement pariétal, $Re_\tau = \rho_g u_\tau H / \mu_g$, l'équation devient,

$$Re_\tau = 2^{-5/8} \alpha^{1/2} Re_H^{7/8} \quad (2.10)$$

$$\iff Re_\tau = 0.171 Re_H^{7/8}. \quad (2.11)$$

L'échelle de longueur visqueuse $\delta_v = \frac{\nu_g}{u_\tau}$ est définie comme le rapport entre la viscosité cinématique et la vitesse de frottement pariétale. Celui-ci peut également être écrit en fonction du Reynolds de frottement,

$$\delta_v = \frac{H}{Re_\tau}. \quad (2.12)$$

La résolution spatiale en paroi est donnée par l'unité de longueur pariétale $y^+ = \frac{\Delta y}{\delta_v}$ (Pope 2000), où Δy est la taille de la cellule de paroi selon la direction y . Cette dernière peut s'exprimer en fonction du Reynolds de frottement par la formule suivante :

$$y^+ = \frac{\Delta y Re_\tau}{H} \quad (2.13)$$

La résolution spatiale en paroi Δy est finalement reliée à y^+ et aux paramètres de l'écoulement gazeux Re_H (eq. (2.7)) en combinant les équations (2.11) et (2.13),

$$\Delta y = 5.829y^+ H Re_H^{-7/8}. \quad (2.14)$$

Maintenant qu'un lien entre la résolution spatiale en paroi et les paramètres de l'écoulement est établi (eq. (2.14)), la stratégie de réduction de coût et le choix de la taille de maille qui en découle vont être discutés dans la partie suivante.

2.4.2 Choix de la résolution spatiale du maillage

Les valeurs des nombres sans dimension décrits précédemment (Tableau 2.3) sont données dans le Tableau 2.4 pour le point de fonctionnement considéré. Il convient de rappeler que toutes

	Cas réel	Cas simulé
Gaz	Air	
U_g [m/s]	50	1
ρ_g [kg/m ⁻³]	1.21	1
μ_g [kg/m/s]	1.82×10^{-5}	5.31×10^{-5}
Liquid	ShellsolD70	
U_l [m/s]	5×10^{-1}	1×10^{-2}
ρ_l [kg/m ⁻³]	770	636.36
μ_l [kg/m/s]	1.56×10^{-3}	5.42×10^{-3}
σ [N/m]	27.5×10^{-3}	1.12×10^{-3}
	Nombres sans dimension	
Re_H	27000	15869
M	15.71	
We	10.78	
μ_l/μ_g	85.95	
ρ_l/ρ_g	636.36	

TABLE 2.4 – Conditions de fonctionnement et nombres sans dimension correspondant.

les longueurs sont normalisées par la hauteur du canal H dans le domaine de calcul. Cependant, pour clarifier l'explication, cette discussion considère des quantités dimensionnelles. En utilisant la relation (2.14), la condition $y^+ = 1$ conduit à une taille de maille de $6.28 \mu\text{m}$. En supposant un maillage tel que $0.5\Delta x = \Delta y = 0.5\Delta z = 6.28 \mu\text{m}$, le maillage obtenu comporte environ 2.2×10^9 éléments ce qui est impossible à simuler avec les capacités de calculs disponibles. Comme ce travail se concentre sur l'écoulement du film liquide et son atomisation primaire, une discrétisation précise du film est assurée par l'utilisation de 10 cellules dans la hauteur de film. La hauteur expérimentale du film étant de $100 \mu\text{m}$, cela conduit à une taille de maille de $\Delta y = 10 \mu\text{m}$ dans le film liquide. L'échelle de longueur visqueuse δ_v étant négligeable devant la hauteur du film, nous faisons l'hypothèse qu'elle ne joue pas un rôle dominant dans la dynamique du film et par conséquent son atomisation. Ainsi, pour respecter la condition $y^+ = 1$ tout en imposant $\Delta y = 10 \mu\text{m}$, δ_v est augmenté de $\delta_v = 6.28 \mu\text{m}$ à $\delta_v = 10 \mu\text{m}$. Suivant la relation (2.14), cette modification est directement répercutée sur Re_H (eq. (2.7))

qui est supposé ne pas modifier la dynamique de l'écoulement liquide tant que les nombres M , We , μ_l/μ_g et ρ_l/ρ_g sont conservés. Le nombre de Reynolds de l'écoulement gazeux vaut donc maintenant $Re_H = 15869$. Les propriétés physiques du gaz et du liquide sont ensuite recalculées à partir de cette valeur de Re_H pour conserver les quatre nombres sans dimension d'intérêt. En prenant arbitrairement la masse volumique ρ_g et la vitesse bulk U_g du gaz égales à l'unité, le Tableau 2.4 donne les valeurs obtenues pour le point de fonctionnement considéré dans l'étude. En choisissant un maillage tel que $0.5\Delta x = \Delta y = 0.5\Delta z = 10 \mu\text{m}$, nous obtenons un maillage constitué d'environ 540×10^6 éléments. La taille du maillage est finalement diminuée à 61×10^6 éléments en étirant les cellules dans la direction y avec un taux de croissance de 1.03 loin du préfilmeur. La Figure 2.2 rend compte du maillage considéré dans la direction y .

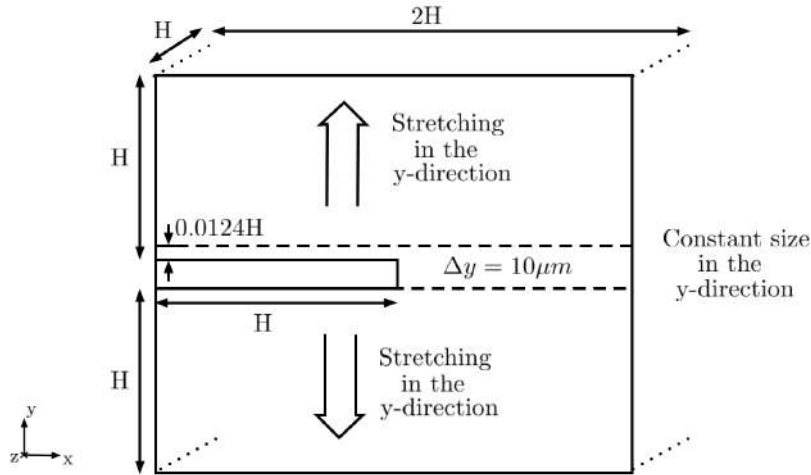


FIGURE 2.2 – Raffinement de maillage dans la direction y .

Notons que la complexité de l'interface liquide/gaz et le nombre important d'échelles en jeu rendent presque impossible l'évaluation de la résolution du maillage nécessaire pour atteindre une simulation numérique directe de l'atomisation. Cependant, dans la communauté des simulations numériques diphasiques par suivi d'interface, une simulation est appelée simulation numérique directe dès lors la résolution du maillage est suffisante pour capturer précisément les caractéristiques principales de l'atomisation.

Il est cependant possible d'estimer l'échelle de Kolmogorov l_η afin de s'assurer que la résolution du maillage est suffisante pour capturer les plus petites échelles de la turbulence de l'écoulement gazeux dans la région d'intérêt. En utilisant les valeurs correspondantes au point de fonctionnement données dans le Tableau 2.4, la longueur l_η est donnée par l'équation (2.15).

$$l_\eta = \left(\frac{\nu_g^3}{\epsilon/\rho_g} \right)^{1/4} \quad (2.15)$$

où ρ_g et ν_g sont la masse volumique et la viscosité cinématique du gaz du cas simulé. ϵ fait référence à la dissipation de l'énergie turbulente. Sa valeur peut être estimée à partir de l'équation (2.16) qui utilise la vitesse intégrale U_0 et l'échelle de longueur intégrale l_0 .

$$\frac{|\epsilon|}{\rho_g} \approx \frac{U_0^3}{l_0} \quad (2.16)$$

Comme proposé par Ling et al. (2019), la vitesse des vagues à l'interface liquide/gaz de Dimotakis U_D (Dimotakis 1986) fournit une bonne approximation de la vitesse intégrale U_0 pour les problèmes diphasiques à interface liquid/gaz. La hauteur du canal est choisie comme échelle de longueur intégrale l_0 . La vitesse de Dimotakis est donnée par la relation (2.17) et vaut $U_D = 4.77 \cdot 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}$.

$$U_D = \frac{\sqrt{\rho_g}U_g + \sqrt{\rho_l}U_l}{\sqrt{\rho_g} + \sqrt{\rho_l}} \quad (2.17)$$

En appliquant l'équation (2.16) puis l'équation (2.15), l'échelle de Kolmogorov estimée ici vaut $l_\eta = 49.33 \text{ }\mu\text{m}$. Pope (2000) indique que les plus petites échelles turbulentes sont résolues dans un écoulement gazeux par un maillage de résolution Δ lorsque :

$$\frac{\Delta}{l_\eta} \leq 2.1. \quad (2.18)$$

La taille maximum des cellules du maillage dans la région d'intérêt étant $\Delta = 20 \text{ }\mu\text{m}$ (direction x et z), le critère de l'équation (2.18) est bien satisfait. Le calcul constitue donc une simulation numérique directe de la turbulence de l'écoulement gazeux dans la région d'intérêt.

2.5 Résultats

La simulation numérique est réalisée sur un temps physique de 46.8 ms allant du développement du film liquide jusqu'à un processus d'atomisation primaire stabilisé. Le temps simulé correspond à environ 144 temps convectifs de l'écoulement gazeux à travers le domaine, et 3 convection du film liquide le long du préfilmeur. La simulation est réalisée avec un nombre de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) de 0.7 ce qui donne un pas de temps d'environ $\Delta t^* \approx 1 \cdot 10^{-3}$. Le coût total de cette simulation est de 1.2 millions d'heures sur les processeurs CPU Intel Skylake du supercalculateur Irene Joliot Curie (TGCC, GENCI, France). La Figure 2.3 compare les visualisations expérimentales obtenues par ombroscopie avec les résultats numériques à trois instants. Les images ont été temporellement et spatialement redimensionnées pour permettre une comparaison directe entre la simulation et l'expérience. Pour une longueur de domaine calculée l^* , la longueur réelle l est égale à $l = l^* \cdot H$. Pour un temps de simulation t^* , le temps physique t vaut $t = t^* \cdot H/U_g$. Dans la suite, les instabilités à la surface du film liquide ainsi que leur fréquence dominante dans la direction longitudinale sont étudiées. Le processus d'atomisation primaire est ensuite caractérisé et la distribution de tailles de gouttes résultante est extraite puis discutée.

2.5.1 Analyse de l'écoulement du film liquide

Description qualitative

Dans la présente étude, le film liquide à faible vitesse est cisailé par un écoulement de gaz à haute vitesse en présence d'un fort saut de masse volumique couplé à un important rapport de flux de quantité de mouvement. Cette situation est similaire à la configuration expérimentale de couche de liquide cisailée par un gaz à haute vitesse étudiée par Raynal (1997), Ben Rayana et al. (2006) ou Fuster et al. (2013). Une étude numérique de la configuration eau-air de Fuster et al. (2013) a par ailleurs également été réalisée par Chiodi & Desjardins (2017a) montrant la capacité du code NGA à reproduire les résultats expérimentaux. Les auteurs de ces études

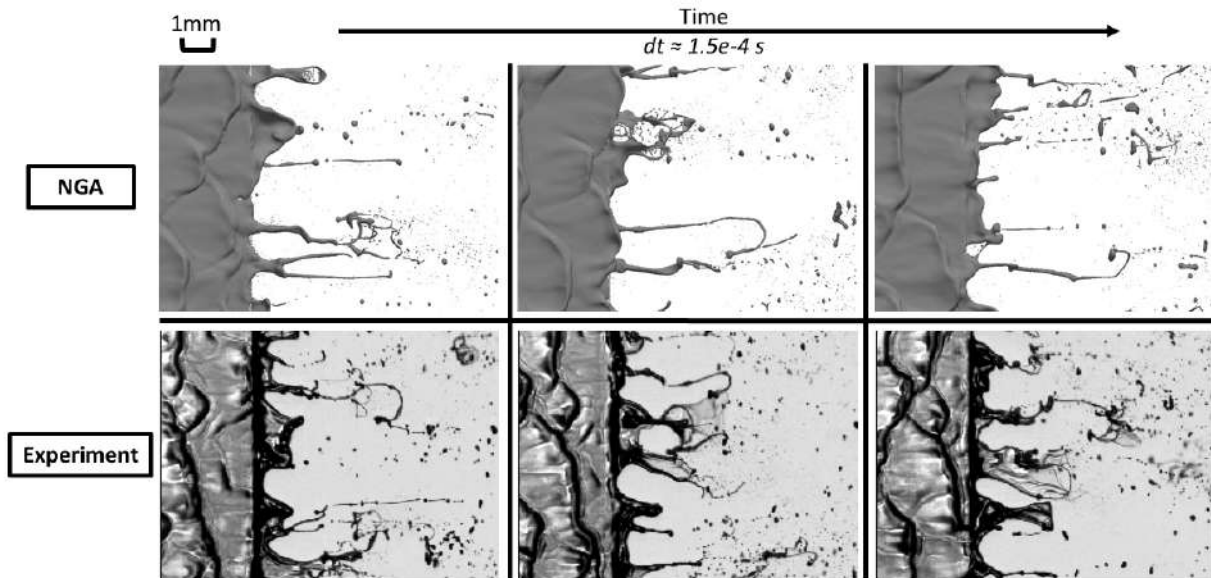


FIGURE 2.3 – Visualisation du processus d'atomisation à trois instants consécutifs. En haute, les résultats du calcul (champ d'interface PLIC). En bas, les résultats expérimentaux.

ont observé que ce type de configuration est sujette au développement de vagues à la surface du liquide selon un processus en deux étapes. Tout d'abord, l'apparition d'une instabilité de Kelvin-Helmholtz engendre la formation d'une onde 2D primaire à la surface du liquide dans la direction longitudinale de l'écoulement (Ben Rayana et al. 2006). La crête de l'onde primaire subit ensuite des déformations créant des ondes 3D dans la direction transversale. Ces ondes interfaciales longitudinales (i.e. dans la direction x) et transversales (i.e. dans la direction z) sont parfaitement observées dans la Figure 2.3 où la structure des ondes 3D est en bon accord entre la simulation et l'expérience. L'observation précise du film liquide visible dans la Figure 2.4 permet de diviser la structure des ondes en trois régimes. En effet, proche de l'injection du liquide, les ondes sont dans un régime 2D quasi-périodique. Ce régime est piloté par l'instabilité de Kelvin-Helmholtz et seule une petite déformation des ondes dans la direction transversale est observée. La crête des ondes devient ensuite instable ce qui génère des instabilités transversales. Ces dernières grandissent jusqu'à ce qu'un régime 3D pleinement établi soit atteint. Cette décomposition en trois régimes d'instabilité a également été décrite par Gosselin et al. (2017) dans un cas airblast annulaire avec formation d'un film. Cependant, dans le cas d'un régime 3D établi, appelé "disrupted zone", les auteurs n'observent pas de fréquence spatiale caractéristique aux instabilités. Comme le montre la Figure 2.3, le comportement est différent dans le cas de cette configuration plane où des structures résultantes des ondes 2D initiales sont toujours clairement visibles dans le régime 3D établi.

Analyse de la fréquence longitudinale dominante

La fréquence d'instabilité longitudinale dominante est extraite de la simulation à partir de l'évolution de la hauteur du film liquide au cours du temps pour une position axiale donnée sur le préfilmeur. Une transformation de Fourier (FFT) est ensuite appliquée à cette valeur. Dans le but d'améliorer les résultats obtenus, à chaque position axiale x , une FFT est calculée

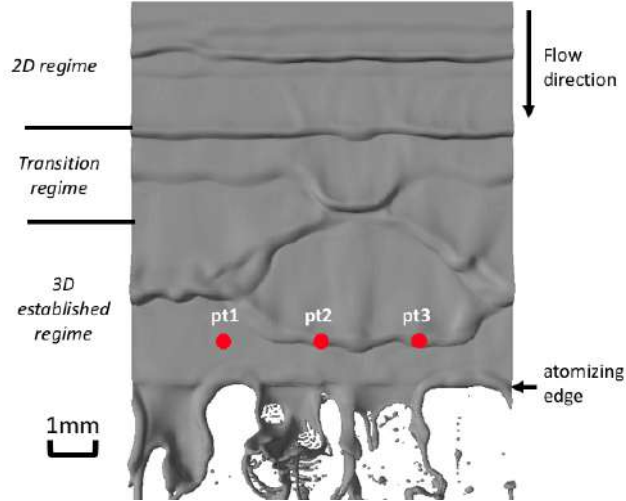


FIGURE 2.4 – Image instantanée du film liquide issue de la simulation (champ d’interface PLIC). Les points Pt1, Pt2 et Pt3 sont respectivement placé en $z = 0.25H$, $z = 0.5H$ et $z = 0.75H$ et dans cette exemple à 1cm ($0.12H$) du bord d’atomisation.

en trois points selon la direction z , en $z_1 = 0.25H$, $z_2 = 0.5H$ et $z_3 = 0.75H$, et les pics de fréquence qui ne sont pas partagés par les trois points sont filtrés grâce à la formule de spectre croisé de l’équation (2.19). La fréquence dominante est finalement déterminée comme celle avec la plus haute amplitude.

$$\chi = (FFT[Pt(x, z_1)] \cdot FFT[Pt(x, z_2)]^* \cdot FFT[Pt(x, z_3)]^*) \quad (2.19)$$

où FFT représente l’opération de transformation rapide de Fourier et FFT^* est son conjugué. Les visualisations expérimentales ne donnent pas un accès direct à la hauteur de film. Cependant, plus la déformation de interface du film liquide est importante, plus la lumière est déviée et sa transmission est atténuée. Les variations locales de la hauteur de film sont en conséquence directement liées à l’évolution du niveau de gris des pixels des images. La fréquence dominante est donc extraite en enregistrant l’évolution du niveau de gris en trois points pour une position axiale et en appliquant l’analyse précédente. L’analyse de fréquence est réalisée à partir de 247 solutions pour la simulation, et de 300 images pour l’expérience, avec une fréquence d’échantillonnage d’environ 6.1 kHz, et 7 kHz.

La Figure 2.5 présente le spectre croisé obtenu à partir d’une analyse à une distance axiale de 1 cm ($0.12H$) avant le bord d’atomisation du préfilmeur. La position des trois points utilisés pour l’analyse est visible sur la Figure 2.4. A cause du nombre limité de solutions disponibles, la convergence statistique de la FFT pour la simulation est faible et la courbe de spectre croisé n’admet pas une pic clair. Cependant, elle permet d’estimer la fréquence dominante autour de 410 Hz. Même si une correspondance parfaite n’est pas retrouvée avec la fréquence expérimentale, la Figure 2.5 montre un bon accord entre les deux analyses. La même analyse est effectuée pour différentes positions axiales et l’évolution spatiale de la fréquence dominante du spectre est présentée en Figure 2.6. Une haute fréquence autour de 1400 Hz peut être remarquée proche de la condition d’entrée. Elle est supposée être liée à une instabilité numérique. Pour cette raison, nous considérons uniquement les régions où $x > 0.15$ pour lesquelles les phénomènes physiques sont établis. Dans la première partie du préfilmeur, entre $x = 0.15H$ et $x = 0.5H$,

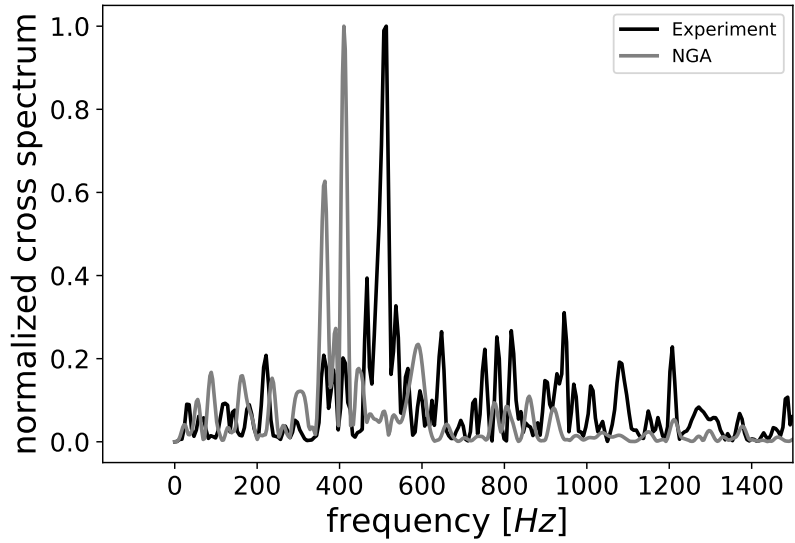


FIGURE 2.5 – Spectres croisés obtenus à partir de transformés de Fourier appliquées aux points pt1, pt2 et pt3 localisés à une distance de 1 cm ($0.12H$) avant le bord d'atomisation. En noir le spectre expérimental. En gris, le spectre issu de la simulation.

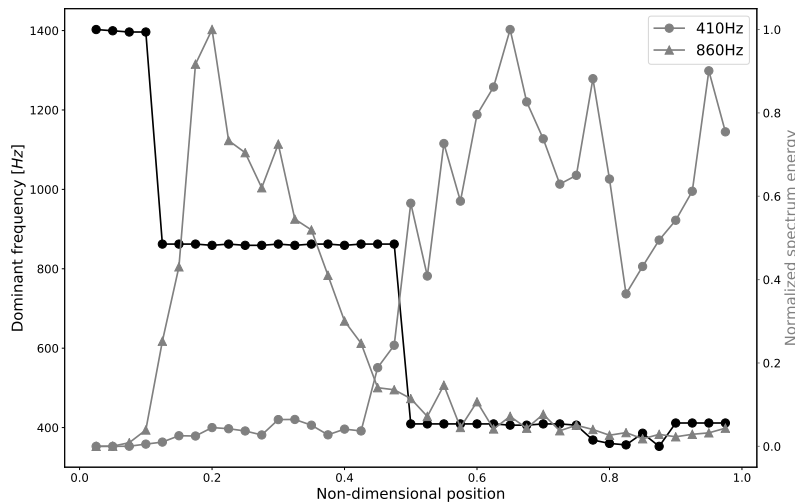


FIGURE 2.6 – Evolution spatiale de la fréquence dominante (ligne noir avec des points) et des spectres normalisés d'énergie de la fréquence 410Hz (ligne grise avec des points) et de la fréquence 860Hz (ligne grise avec des triangles) obtenu à partir des données de simulation.

la fréquence dominante est d'environ 860Hz avant de tomber ensuite à 410 Hz. L'observation de l'énergie normalisée dans le spectre des fréquences de 410 Hz et 860 Hz souligne également ce changement de fréquence dominante. En effet, l'énergie dans le spectre de la fréquence 860 Hz atteint un pic autour de $x = 0.2H$ puis décroît drastiquement jusqu'à devenir très faible autour de $x = 0.5H$. Dans le même temps, la fréquence 410 Hz apparaît dans le spectre autour de $x = 0.425H$ et croît rapidement pour devenir dominante dans la seconde moitié du préfilmeur. La Figure 2.7, qui représente le spectre de fréquence en différentes positions axiales, conforte ces observations. Entre les positions axiales $x = 0.15H$ et $x = 0.4H$, le spectre

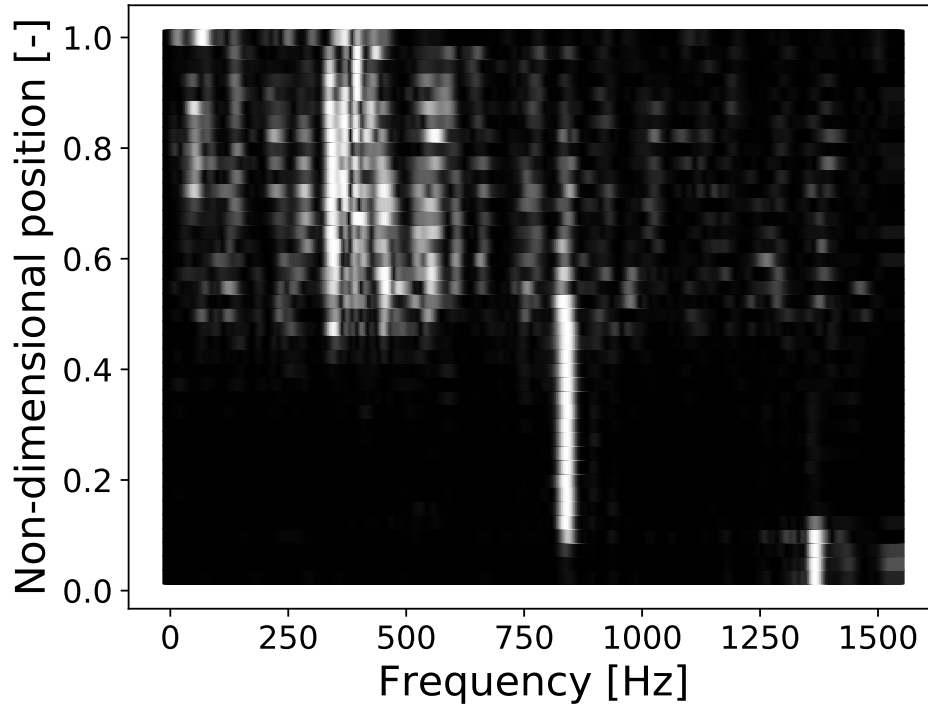


FIGURE 2.7 – Evolution spatiale du spectre de fréquences obtenu à partir des données de simulation.

permet d'identifier clairement une fréquence dominante autour de 860 Hz. Comme observé précédemment dans la Figure 2.6, cette fréquence disparaît quasiment du spectre autour de $x = 0.5H$. Le spectre n'admet ensuite plus de pic clairement identifiable du fait de l'influence des instabilités transversales sur le signal. Cependant, une instabilité dominante autour de 410 Hz peut être identifiée. Cette division de la fréquence dominante par un facteur d'environ deux pourrait s'expliquer par un appariement de vagues d'instabilité.

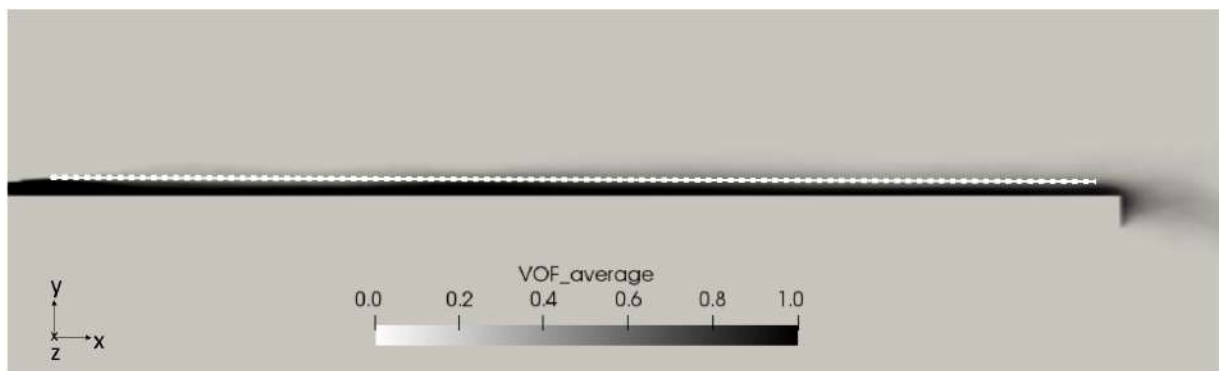


FIGURE 2.8 – Plan central $z = 0.5H$ coloré par le champ de VOF moyenné temporellement. La ligne avec des points correspond à la position le long de l'interface liquide/gaz où les 1000 sondes sont placés pour la construction du diagramme de Hovmöller

Ce phénomène est étudié par la construction d'un diagramme de Hovmöller (1949) coloré

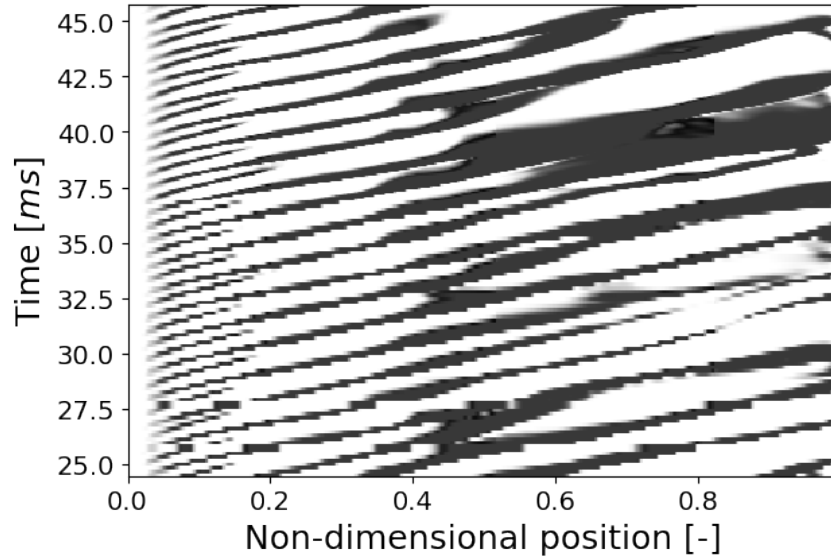


FIGURE 2.9 – Diagramme de Hovmöller

par la fonction VOF. Il représente l'évolution spatio-temporelle de cette grandeur mesurée par une série de 1000 sondes distribuées le long d'une ligne suivant l'isocontour 0.5 du champ moyen de la fonction VOF (Figure 2.8). Le diagramme est présenté en Figure 2.9. Les lignes grises sont engendrées par le passage des vagues d'instabilité. Notons ici que la vitesse de convection des vagues est égale à l'inverse de la pente des lignes grises. La Figure 2.9 met en évidence un motif périodique clair entre $x = 0.2H$ et $x = 0.4H$. Des appariements de vagues entre $x = 0.4H$ et $x = 0.6H$ sont aussi clairement visibles lors de la fusion de deux lignes grises en une seule. Ce phénomène apparaît autour de $x = 0.4H$ ce qui correspond au début du régime de transition précédemment identifié. Le mécanisme derrière l'appariement peut être expliqué à partir de la Figure 2.10. Entre $x = 0.3H$ et $x = 0.6H$, la vague 2D W1 grossit et s'étend dans la direction normale de l'écoulement. Lorsque sa crête a atteint un niveau d'élévation suffisant, la vague est susceptible d'être significativement impactée par l'écoulement gazeux à forte quantité de mouvement induisant une accélération axiale. Cette accélération axiale conduit la vague W1 à rattraper et finalement s'apparier à la vague W2.

Comme observé sur la Figure 2.9, la quasi-totalité des appariements de vagues ont lieu avant la position axiale $x = 0.65H$. De surcroît, comme observé dans la Figure 2.3, les vagues transversales semblent très bien développées après cette position. La fréquence dominante y est également indépendante de la position axiale. Le régime peut donc être considéré comme établi. Ainsi, malgré la différence de longueur du préfilmeur entre la simulation et l'expérience, la fréquence de 410 Hz est directement comparable à la fréquence expérimentale de 513 Hz. Il convient de remarquer que cet écart d'environ 100 Hz pourrait provenir d'une erreur d'évaluation du champ de vitesses en entrée de la simulation. En effet, le profil de vitesses en entrée du domaine est extrait d'une simulation LES de la zone d'essai. Or, pour des raisons de coût de calcul, cette simulation est monophasique gazeuse. L'influence éventuelle de l'écoulement du film liquide sur le profil de vitesses du gaz en entrée est donc négligée et le champ de vitesses dans le film liquide est assimilé à un profil plat. Cette piste n'a malheureusement pas pu être investiguée dans cette étude mais elle pourrait faire l'objet de travaux futurs.

Cette analyse montre que le solveur NGA combiné avec notre approche permet de pré-

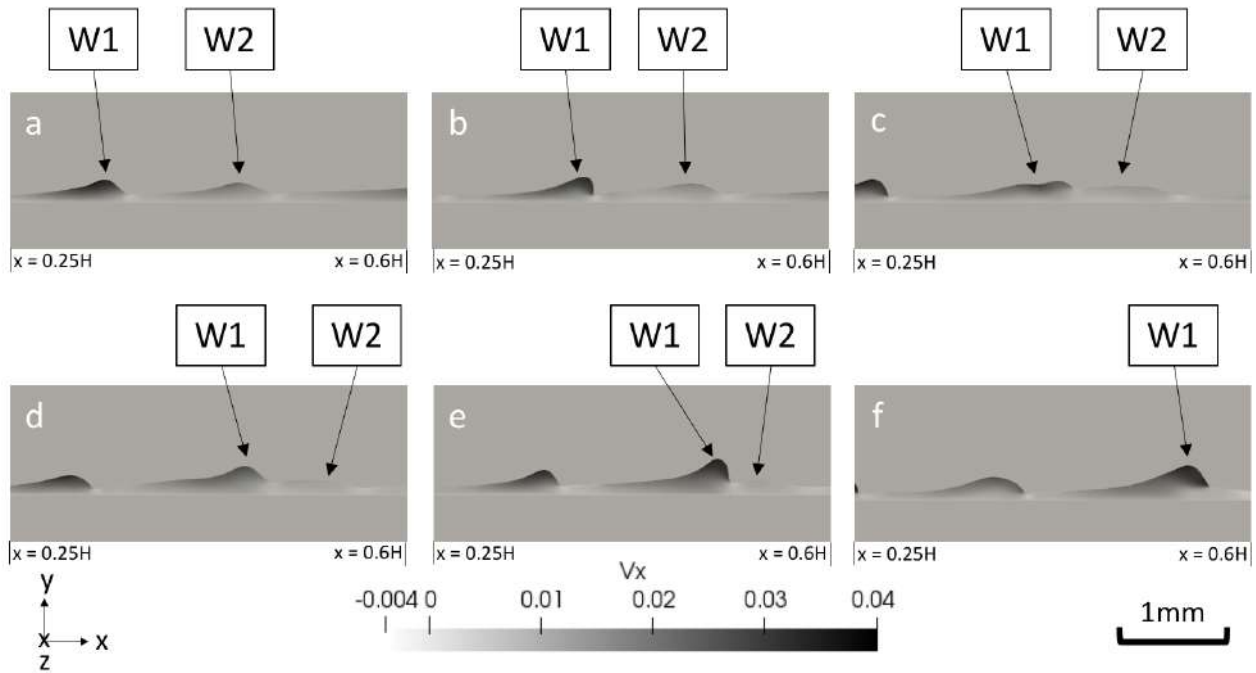


FIGURE 2.10 – Visualisations instantanées d'un processus d'appariement de deux vagues d'instabilités entre $x = 0.25H$ et $x = 0.6H$ dans le plan central $z = 0.5H$. Le pas de temps entre les images est de 6.10^{-4} s.

dire les instabilités d'interface de l'écoulement du film liquide, et en particulier la fréquence longitudinale dominante, en un bon accord avec l'expérience.

2.5.2 Processus d'atomisation

Comparaison qualitative du processus d'atomisation primaire

Comme nous pouvons l'observer dans la Figure 2.3, le liquide s'accumule au bord du préfilmeur formant ainsi un réservoir. L'écoulement rapide de gaz de chaque côté du préfilmeur engendre ensuite son élongation dans la direction de l'écoulement puis son atomisation en goutte selon deux processus bien distincts.

Le premier processus passe par la formation de structures ligamentaires de différentes tailles qui sont ensuite atomisées sous l'effet des instabilités d'interface et des forces capillaires. Ce phénomène est assimilable à un processus d'atomisation de Rayleigh-Plateau (Lord Rayleigh 1878). La Figure 2.11 (a) offre une vue comparative d'un processus d'atomisation par formation de ligaments observé dans l'expérience (bas) et dans la simulation numérique (haut) et montre une bonne ressemblance entre les deux.

Le second processus observé est lié à la formation de structures en forme de sacs. Ce régime d'atomisation a été décrit par Gepperth et al. (2010) à partir des expériences. Les auteurs font une analogie entre ce phénomène et le processus d'atomisation de sacs ("bag breakup") observable dans certains régimes d'atomisation secondaire Guildenbecher et al. (2009). La Figure 2.11 (b) compare ce processus d'atomisation observé dans l'expérience et dans la simulation numérique. Une structure en forme de sac commence par se former au niveau du bord du préfilmeur. Puis, elle s'allonge dans la direction de l'écoulement, commence à se séparer du bord et

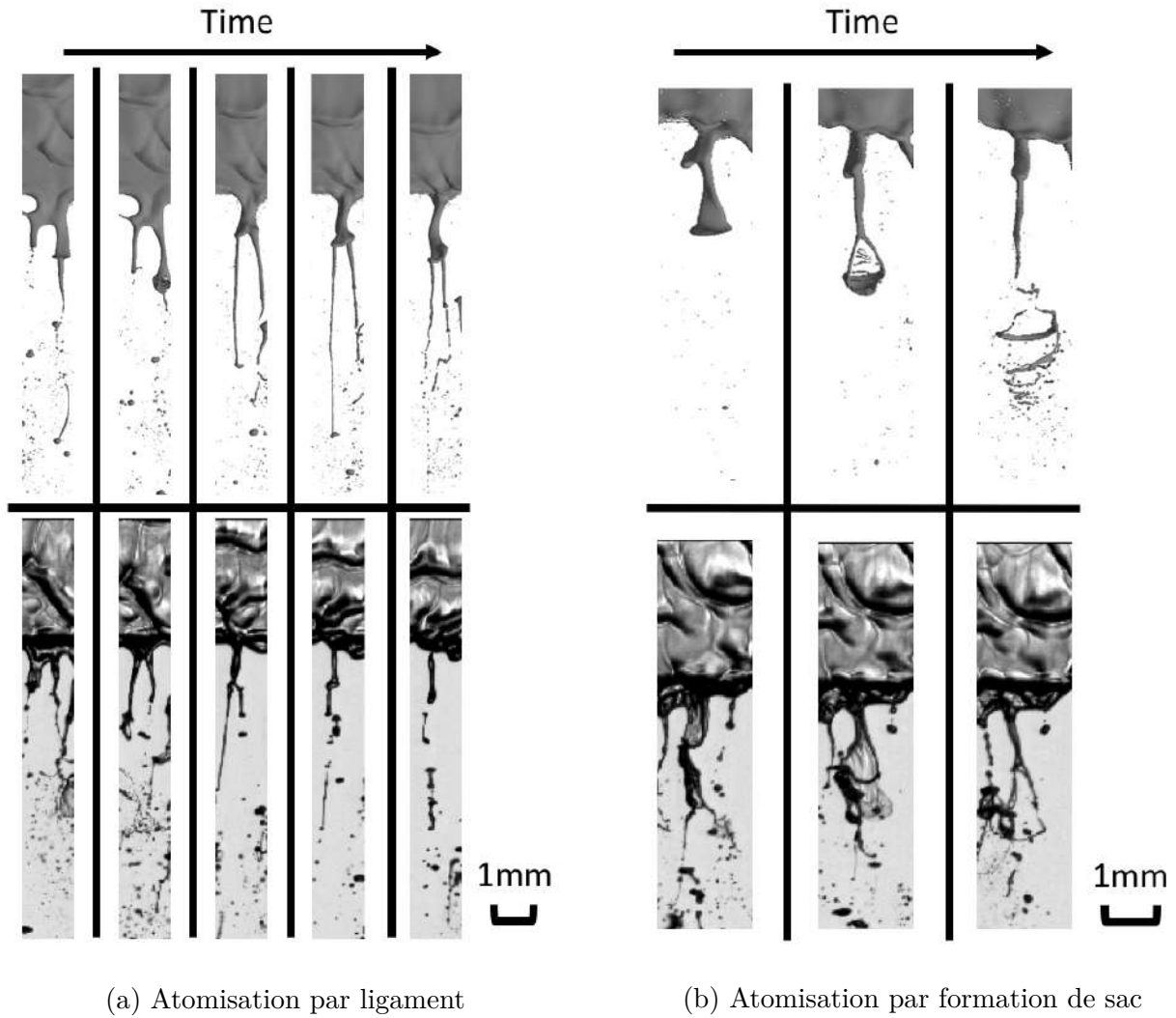


FIGURE 2.11 – Images instantanées (a) de l’atomisation d’un ligament et (b) d’un phénomène d’atomisation par sac. En haut, les résultats issus du calcul (champ d’interface PLIC). En bas, les résultats expérimentaux.

à grossir jusqu’à exploser en une multitude de petites gouttes. La Figure 2.11 (b) permet d’observer que l’atomisation du sac apparaît plus rapidement dans la simulation. Cette atomisation précoce s’explique par le fait que l’épaisseur de l’interface du sac atteint la limite de résolution du maillage (i.e. $10\mu\text{m}$). Malgré le fait que sa durée de vie soit plus courte dans la simulation que dans l’expérience, le processus d’atomisation par formation de sacs est bien prédit par la simulation.

Cette étude qualitative montre une nouvelle fois la capacité du solveur NGA couplé avec notre stratégie de réduction de coût à reproduire les phénomènes physiques impliquant le liquide, ici l’atomisation primaire, avec une précision convenable. Une comparaison quantitative des distributions de tailles de gouttes est réalisée dans la section suivante.

Distribution de tailles de gouttes

Méthode de post-traitement Les données expérimentales issues des travaux de Gepperth et al. (2012), nous ont été fournies par le KIT-ITS sous la forme d'images brutes issues d'une analyse par ombroscopie acquises par une caméra ultra-rapide avec une résolution spatiale de $13.9 \mu\text{m}$ et une fréquence d'acquisition de 7 kHz. Une méthode de post-traitement a été mise en place afin d'extraire les distributions de taille des gouttes issues de l'expérience et de la simulation numérique de façon consistante. La méthode développée se résume en trois étapes principales détaillées dans la suite : binarisation, identification des structures de gouttes et calcul de la taille des gouttes.

Comme évoqué précédemment, les images expérimentales sont des images brutes d'ombroscopie. Elles nécessitent donc un pré-traitement spécifique pour enlever le bruit de fond sur les images avant de les binariser. Cette étape est réalisée en utilisant la stratégie de seuillage proposée par Prasad & Sreenivasan (1989). La méthode consiste à seuiller chaque image expérimentale par un niveau de gris puis à évaluer le niveau de gris moyen restant sur l'image. Cette opération est réalisée pour différents niveaux de seuil permettant de construire pour chaque image la courbe de l'intensité moyenne résultante en fonction du seuil considéré. Ces courbes peuvent être visualisées en gris sur la Figure 2.12. Dans le but de déterminer une valeur de seuil

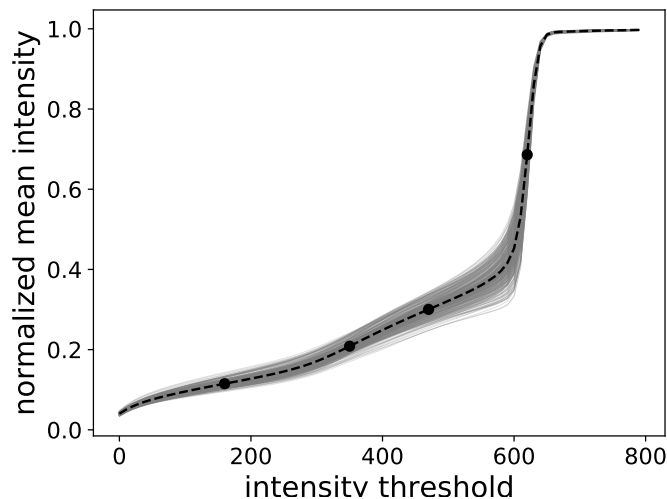


FIGURE 2.12 – Courbes d'intensité moyenne. Les lignes grises sont les courbes pour chaque images et la ligne noir en pointillés est la courbe moyenne sur toutes les images. Les points noirs représentent les points d'inflexion de la courbe moyenne.

commune à toutes les images, Prasad & Sreenivasan (1989) proposent de s'intéresser aux points d'inflexion de la courbe moyenne. Cette courbe est présentée en pointillés. Les points noirs sont ses points d'inflexions. Dans le cas présent, une valeur de seuil de 350 permet de retirer le bruit de fond tout en conservant les structures liquides. La Figure 2.13 donne un exemple d'une image expérimentale avant et après les étapes de seuillage et de binarisation. Les données 3D de la DNS de l'écoulement sont pour leur part réduites à des champs 2D similaires à ceux obtenus par ombroscopie en projetant dans un même plan la fraction de volume de liquide contenue dans une isosurface de VOF et en les binarisant. Bien qu'il soit plus précis, le champ issu de la reconstruction PLIC n'est pas utilisé ici car il n'est, par nature, pas parfaitement continu ce

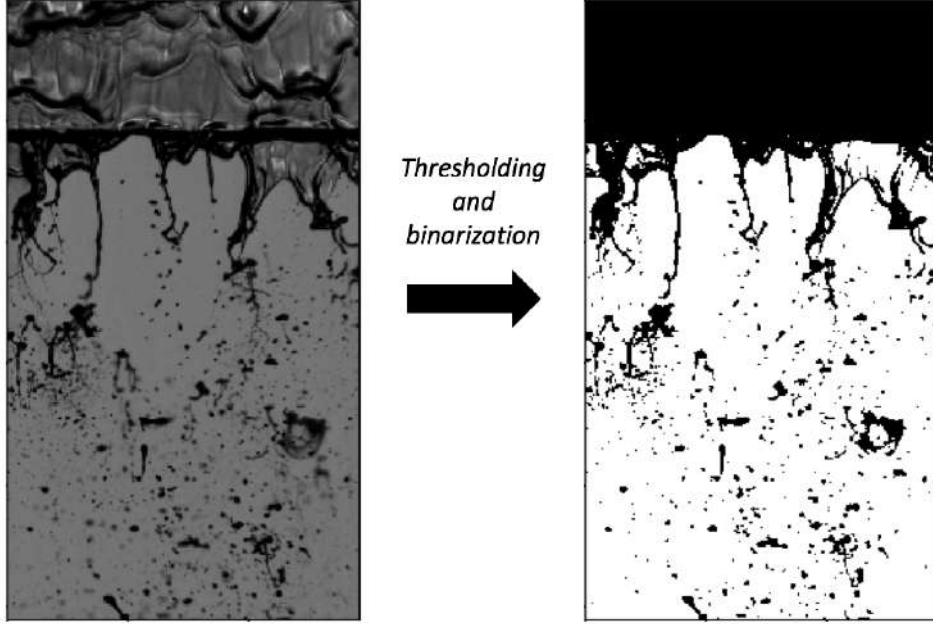


FIGURE 2.13 – Exemple d’une image expérimentale avant (gauche) et après (droite) les opérations de seuillage et de binarisation.

qui peut poser des problèmes aux algorithmes de reconnaissance de gouttes.

Un algorithme CCL (Connected Component Labelling) à 8 voisins est ensuite appliqué sur les images binaires pour identifier les structures liquides présentes à chaque pas de temps. Des informations de topologie, comme l’aire A et la longueur entre les 2 points les plus éloignés l_{max} , sont également extraites. Un critère d’excentricité est alors construit à partir de ces deux paramètres.

$$e = \sqrt{1 - \frac{R_{eq}^2}{R_{max}^2}} \quad (2.20)$$

Où R_{eq} et R_{max} sont respectivement le rayon obtenu à partir de l’aire équivalent A et de la moitié de la longueur maximale l_{max} .

$$R_{eq} = \sqrt{\frac{A}{\pi}} \quad (2.21)$$

$$R_{max} = \frac{l_{max}}{2} \quad (2.22)$$

La structure est identifiée comme une goutte lorsque le critère d’excentricité est inférieur à la valeur arbitrairement choisie de 0.87. La Figure 2.14 montre à gauche une structure que l’algorithme identifie comme une goutte et à droite une structure qui est exclu. Ceci démontre la pertinence du critère d’excentricité choisi pour détecter les structures de gouttes tout en excluant les structures ligamentaires.

Le rayon de la goutte R_{fit} est enfin déterminé en minimisant l’erreur entre la forme de la structure et un cercle à l’aide d’une méthode aux moindres carrés appliquées à tous les points

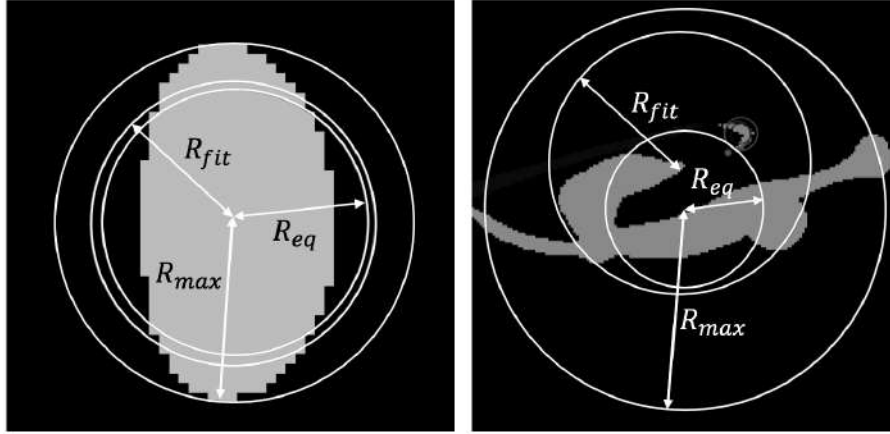


FIGURE 2.14 – A gauche, une structure identifiée comme une goutte par l’algorithme. A droite, une structure qui est exclu par l’algorithme.

(x_i, y_i) appartenant au contour de la structure. Ceci revient à minimiser l’expression suivante :

$$\sum_i R_{fit} - \sqrt{(x_i - x_{fit})^2 + (y_i - y_{fit})^2} \quad (2.23)$$

où (x_{fit}, y_{fit}) est la position du centre du cercle. Cette analyse est effectuée dans une zone située entre $x = 1.7H$ et la sortie du domaine de simulation $x = 2H$ afin d’assurer que la majorité gouttes issue de l’atomisation primaire soit formée. Les fonctions de densité probabilité de tailles de gouttes sont ensuite construites à partir des données expérimentales et numériques en utilisant une échantillon de respectivement 300 et 168 images.

Résultats Les fonctions de densité de probabilité de tailles de gouttes sont tracées pour différentes valeurs d’isosurface du champ VOF en Figure 2.15. En effet, la valeur de l’isosurface a un impact sur la fonction de densité de tailles de gouttes obtenue à partir des données numériques. Le choix d’une faible valeur, comme 10^{-5} , révèle des très petites gouttes avec une taille inférieure à celle de la taille de maille tout en grossissant mécaniquement la taille des autres. Lorsque la valeur augmente, par exemple jusqu’à 0.03, les petites gouttes non-résolues disparaissent ce qui a pour conséquence de déplacer la fonction de densité vers les diamètres plus larges et de fusionner les deux pics. Comme les gouttes non-résolues ne sont déjà plus prises en compte dans la distribution, les augmentations successives de la valeur de l’isosurface réduisent artificiellement la taille des gouttes résolues engendrant un décalage de la distribution de tailles de gouttes vers les petits diamètres. Malgré cette sensibilité à la valeur de l’isosurface, la Figure 2.15 montre que la forme et l’ordre de grandeur de la fonction de densité de probabilité de tailles de gouttes sont globalement bien prédits avec un pic de distribution situé entre $50\mu\text{m}$ et $100\mu\text{m}$. Il convient également de remarquer que, pour une valeur d’isosurface de VOF de 0.5, la forme et la position du pic de la fonction de densité de probabilité sont très proches de l’expérience. De façon générale, on peut conclure que les résultats numériques sont en bon accord avec l’expérience puisqu’ils permettent de retrouver l’ordre de grandeur ainsi que la forme générale de la fonction de densité de probabilité quelque soit la valeur de l’isosurface de VOF choisi.

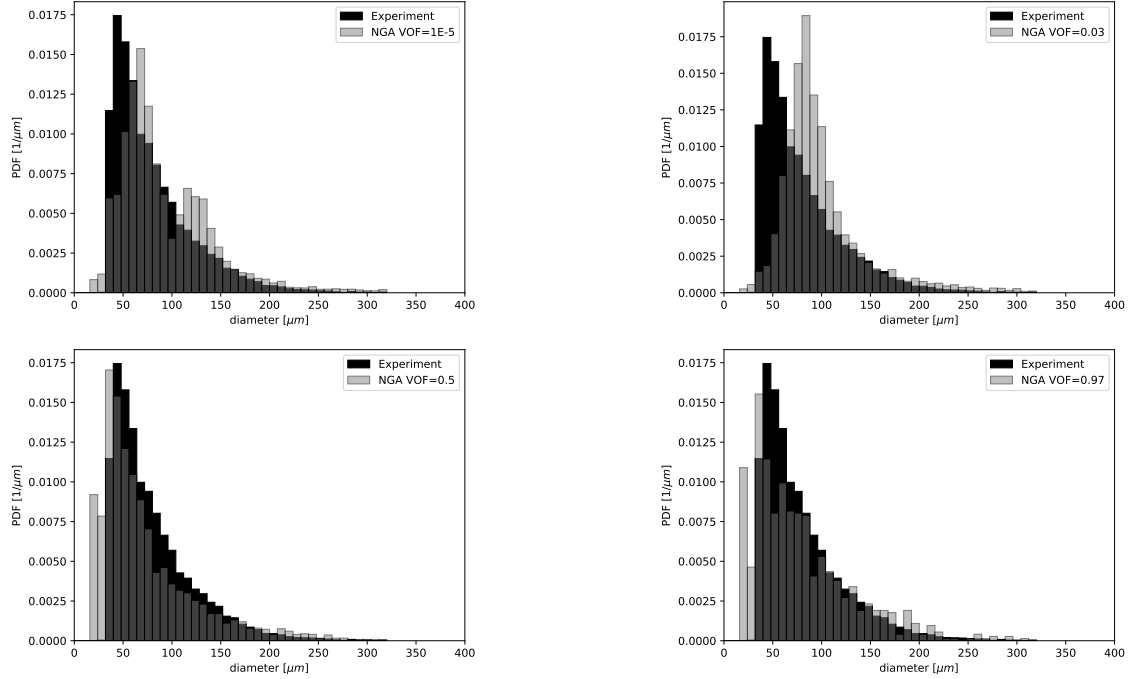


FIGURE 2.15 – Fonctions de densité de probabilité de tailles de gouttes : Comparaison entre l’expérience (noir) et la simulation (gris) en utilisant différents isocontours de champ de VOF. La taille des gouttes est extraites dans une zone située entre $x = 1.7H$ and $x = 2H$ sur un échantillon de 300 images pour l’expérience et 168 images pour la simulation numérique.

2.5.3 Conclusion de l’étude

Une simulation numérique directe d’une configuration d’atomisation de type Airblast avec préfilmeur dérivée des expériences de Gepperth et al. (2012) a été réalisée dans cette étude. Bien qu’initialement extrêmement coûteuse, elle a été rendu possible par l’utilisation du solveur NGA couplé à une stratégie permettant de reproduire fidèlement l’écoulement du film liquide et les processus d’atomisation tout en réduisant le coût de calcul. Basée sur l’hypothèse que les quatre nombres sans dimension M , We , μ_l/μ_g et ρ_l/ρ_g suffisent pour décrire ces phénomènes physiques, il est supposé qu’une légèrement augmentation de l’échelle de longueur visqueuse δ_v , qui engendre une modification du Reynolds de l’écoulement gazeux $Re_H = \rho_g U_g H / \mu_g$, permet de réduire le temps CPU du calcul sans impacter la dynamique du film et le processus d’atomisation primaire. La comparaison qualitative des résultats avec les expériences a montré un très bon accord avec la simulation numérique de l’écoulement du film liquide et des processus d’atomisation. Les vagues d’instabilités longitudinales et transversales à la surface du film liquide sont bien prédites et la fréquence de l’instabilité longitudinale dominante est proche des données expérimentales. Le développement du film est décomposé en trois zones identifiées comme trois régimes. Tout d’abord, proche de l’injection la dynamique des vagues d’instabilités est pilotée par l’instabilité de Kelvin-Helmholtz conduisant à un régime 2D quasi-périodique. Un régime de transition est ensuite observé. Des instabilités transversales apparaissent sur la crête des vagues 2D puis se développent. Un phénomène d’appariement des vagues 2D primaires est également observé dans cette zone. Finalement, un régime 3D établi est atteint. Les vagues transversales y sont pleinement développées et les appariements de vagues 2D primaires y sont

terminés. Concernant l'atomisation du liquide au bout du préfilmeur, deux processus ont pu être clairement identifiés : l'atomisation par formation de ligaments et l'atomisation par la formation de structures en forme de sacs. Ces deux processus sont parfaitement reproduits par la simulation numérique. Une comparaison qualitative de l'atomisation a également été réalisée grâce à la mise en place d'une méthode d'extraction de la taille des gouttes consistante entre la simulation et l'expérience. La comparaison des distributions de tailles de gouttes montre un bon accord entre la simulation et l'expérience quelque soit la valeur de l'isosurface de fonction VOF choisie. Un excellent accord est même trouvé pour une valeur de VOF de 0.5. Ces résultats confirment la validité de la méthodologie proposée et son intérêt pour la réalisation de simulations numériques 3D hautes fidélités d'injecteurs de type Airblast avec préfilmeur à un coût calcul raisonnable. La méthodologie va maintenant être appliquée pour simuler le processus conduisant à l'atomisation primaire du liquide dans une configuration de préfilmeur en forme de marche.

2.6 Cas d'un préfilmeur en forme de marche

L'atomisation d'un film liquide dans le cas d'une configuration de marche, i.e. un préfilmeur d'épaisseur très grande en l'absence d'écoulement gazeuse en dessous, constitue un cas limite pour la configuration précédente (Figure 2.1, droite). Il est donc intéressant de l'étudier afin d'observer et de comparer les processus d'atomisation. Cette étude permettra également de borner le domaine d'utilisation du modèle phénoménologique discuté dans le chapitre suivant.

Bien que ce type de configuration soit utilisé pour certains injecteurs aéronautiques, il est très peu étudié dans la littérature. Les quelques études qui existent traitent le problème sous l'angle du détachement ou non du film liquide au niveau du bord. La première caractérisation de ce processus a été réalisée par Owen & Ryley (1985). Les auteurs ont observé grâce à des expériences que la séparation ou non du film liquide (illustrée dans la Figure 2.16) dépend du régime de l'écoulement. Ils ont également noté qu'il est très difficile d'obtenir une séparation totale du film liquide en bout de préfilmeur. Selon Owen & Ryley (1985), le processus de séparation du film liquide dépend d'un rapport entre les forces d'inertie agissant en faveur de la séparation et la force de tension de surface provoquant sa stabilisation contre la paroi. La gravité peut également jouer un rôle important d'un côté ou de l'autre en fonction de l'orientation de la configuration. En se basant sur ces constatations, Owen & Ryley (1985) ont proposé un modèle pour prédire la séparation du film liquide au bord du préfilmeur en fonction de ses propriétés moyennes en amont de cette zone. Ce modèle montre un bon accord avec les résultats expérimentaux pour les films liquides minces (inférieurs à $100 \mu\text{m}$ d'épaisseur). O' Rourke & Amsden (1996) ont, par la suite, développé un modèle basé sur l'hypothèse que le détachement du film dépend de la différence de pression dans le film liquide au niveau du bord du préfilmeur et de la pression dans l'écoulement gazeux au même endroit juste au-dessus de sa surface. Ce modèle néglige l'influence de l'inertie et de la tension de surface dans ce phénomène et s'exprime uniquement en fonction de la vitesse moyenne du film en amont de la zone de séparation. Cependant, il n'a pas été validé par les auteurs et l'étude réalisée par Steinhaus et al. (2007) semble montrer qu'il n'est pas capable de prédire correctement le détachement ou non du film liquide. Plus tard, Maroteaux et al. (2002) lient, sur la base d'observations expérimentales, le détachement et l'atomisation du film liquide à une instabilité de Rayleigh-Taylor et développent un modèle capable de prédire la séparation ainsi que la taille des gouttes créées. Cependant, comme souligné par Zhang et al. (2017), l'hypothèse selon laquelle l'accélération du film le

long de la paroi a un impact direct dans le processus de séparation est critiquable et n'est pas prouvée. Gubaidullin (2007) note également des incohérences dans la formulation du modèle. De plus, il ne permet pas de retrouver les observations expérimentales dans la configuration de Steinhaus et al. (2007). Constatant l'absence de modèle robuste, Friedrich et al. (2008) ont mené une importante campagne expérimentale et proposé un modèle basé sur la conservation de la quantité de mouvement dans un volume de contrôle centré sur le bord d'atomisation. Un bilan des forces agissant sur ce volume de contrôle leur a ensuite permis d'établir un rapport de forces FR . Il s'exprime en fonction des propriétés moyennes du film liquide en amont du bord d'atomisation. Le schéma 2.16 explicite la configuration et les grandeurs considérées. Le calcul

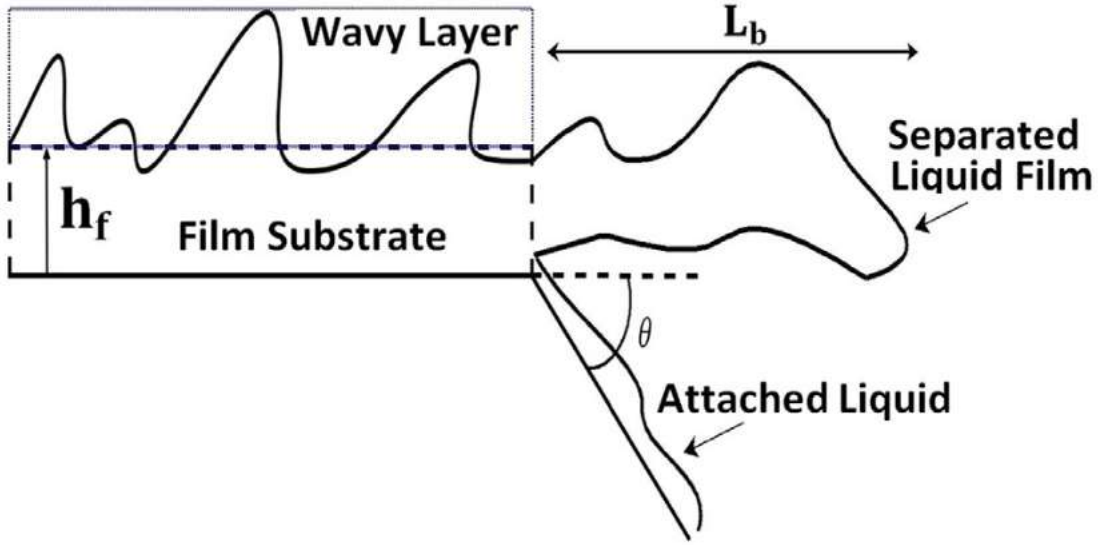


FIGURE 2.16 – Représentation du film liquide au point de séparation en bout de préfilmeur dans le modèle de Friedrich et al. (2008) (issue de Sadeghizadeh & Drallmeier (2018))

du rapport de forces FR est donné par la relation suivante :

$$FR = \frac{\rho_l U_l^2 h_f \sin(\theta)}{\sigma \sin(\theta) + \sigma + \rho_l g h_f L_b \cos(\theta)} \quad (2.24)$$

Dans l'équation (2.24), h_f correspond à la hauteur moyenne de film liquide en amont du bord d'atomisation. σ , ρ_l et U_l sont respectivement le coefficient de tension de surface, la masse volumique du liquide et la vitesse moyenne du film liquide. θ est l'angle de la surface du préfilmeur au bord d'atomisation. g correspond à l'accélération de pesanteur. Le terme lié à la gravité dans le rapport de force FR (eq. (2.24)) fait intervenir la longueur caractéristique d'atomisation L_b . Elle est estimée par Friedrich et al. (2008) à l'aide de la corrélation de Arai & Hashimoto (1985) (eq. (2.25)) dérivée à partir d'expériences d'atomisation de nappes liquides fines.

$$L_b = 0.0388 h_f^{0.5} Re_f^{0.6} We^{-0.5} \quad (2.25)$$

où le nombre de Reynolds Re_f est défini comme

$$Re_f = \frac{\rho_l U_l h_f}{\mu_l}, \quad (2.26)$$

avec μ_l la viscosité dynamique du liquide, et le nombre de Weber We est basé sur la hauteur de film liquide et la vitesse relative entre les deux phases

$$We = \frac{\rho_l (U_g - U_l)^2 h_f}{\sigma}. \quad (2.27)$$

Lorsque le ratio de force FR est strictement inférieur à 1, les forces de stabilisation dominent. Le film liquide change donc de direction au niveau du bord d'atomisation et coule le long de la paroi sans s'en détacher. A l'inverse lorsque le rapport de force devient supérieur à 1, les forces de déstabilisation dominent et le film liquide se détache de la paroi avant de s'atomiser en gouttes. Notons ici que $FR = 1$ correspond à la valeur critique des forces de déstabilisation pour laquelle le film liquide reste attaché à la paroi sans s'atomiser. Le modèle de Friedrich et al. (2008) a été validé dans une large gamme de régime de fonctionnement. Il a par ailleurs été utilisé avec succès par Zhang et al. (2017) pour prédire la séparation d'un film liquide de carburant sous différentes conditions de formation du film liquide.

En prenant en compte les valeurs moyennes de l'écoulement film, les modèles précédents négligent la nature instable de la surface du film liquide. Or, elle est responsable des phénomènes de séparation partielle du film liquide. Ce phénomène de séparation partielle se caractérise par le détachement de la paroi d'une fraction seulement de la masse de liquide tandis que l'autre reste attachée. Il est notamment très présent autour du point critique $FR = 1$ où le modèle de Friedrich et al. (2008) prédit un détachement soudain du film liquide. Afin d'améliorer le comportement des modèles dans cette zone, et donc la prédiction du début de l'atomisation, Bacharoudis et al. (2014) ont construit un modèle simplifié, appelé SAM, basé sur la configuration présentée en Figure 2.17 qui intègre la présence de vagues d'instabilité dans le processus de séparation. Le ratio de force FR du modèle SAM s'écrit :

$$FR = \frac{\rho_l dh_f L_w \frac{c_w^2}{R_c + h_f} - \rho_l dh_f L_w g \cos(\theta)}{4\sigma} \quad (2.28)$$

Dans l'équation (2.28), c_w correspond à la vitesse moyenne des vagues d'instabilités tandis que dh_f et L_w sont respectivement leurs hauteurs et leurs largeurs dans la direction de l'écoulement. La Figure (2.18) explicite la définition de dh_f et L_w . Notons que dans le cas d'un bord en angle droit $\theta_c = 90^\circ$ et non-arrondi $R_c = 0$, l'équation (2.28) devient :

$$FR = \frac{\rho_l dh_f L_w c_w^2}{4\sigma h_f} \quad (2.29)$$

Bien que ce modèle sous-estime légèrement l'apparition de l'atomisation (théoriquement à $FR = 1$ lorsqu'elle correspond plutôt à un point de fonctionnement à $FR = 2$ dans certains cas expérimentaux), les auteurs ont montré en le comparant à une série d'expériences qu'il prédit globalement bien le comportement d'atomisation du film liquide avec, notamment, la prise en compte des états où le film s'atomise partiellement. Notons que Sadeghizadeh & Drallmeier (2018, 2019) ont montré que les caractéristiques des instabilités primaires de film de large amplitude (hauteur, fréquence, masse déplacée par l'instabilité) ainsi que la viscosité du liquide joue également un rôle important dans l'apparition de l'atomisation. Ceci pourrait expliquer la sous-estimation de ce phénomène par le modèle SAM (Bacharoudis et al. 2014) qui est basé uniquement sur un équilibre des forces. Cependant, Sadeghizadeh & Drallmeier (2018) indique que, face à l'absence d'étude théorique et/ou expérimentale pour comprendre finement

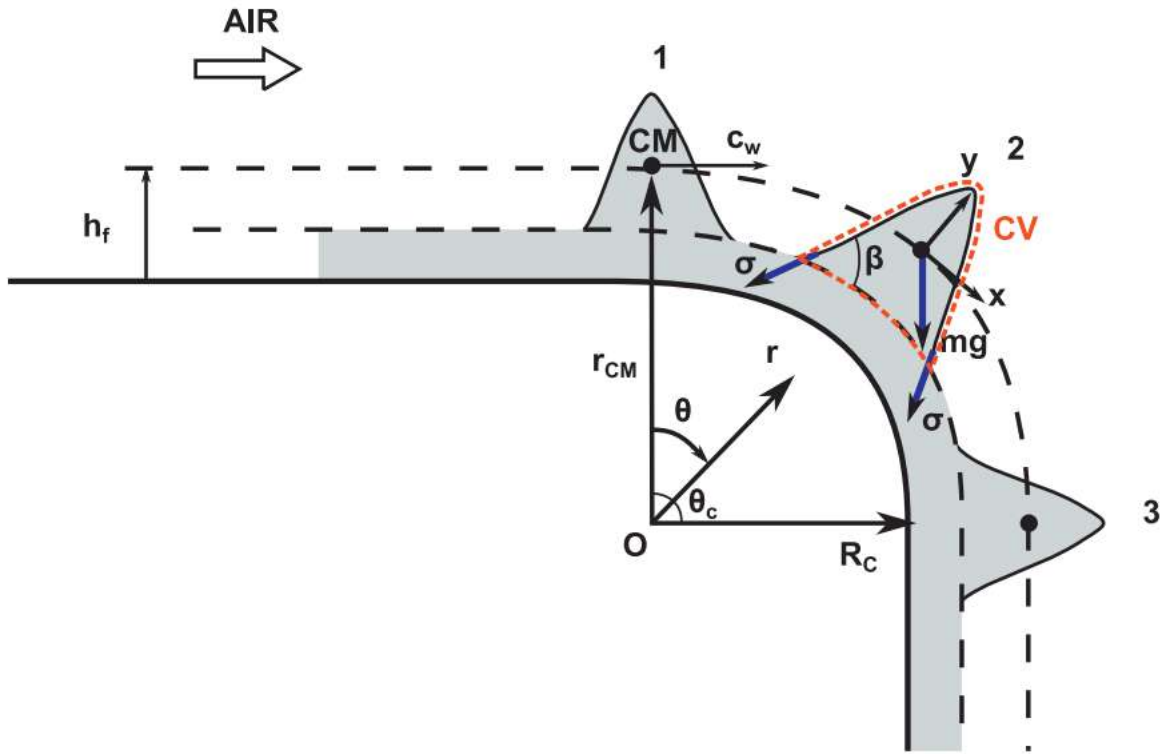


FIGURE 2.17 – Configuration du film liquide au point de séparation en bout de préfilmeur considérée pour le modèle SAM (issue de Bacharoudis et al. (2014)).

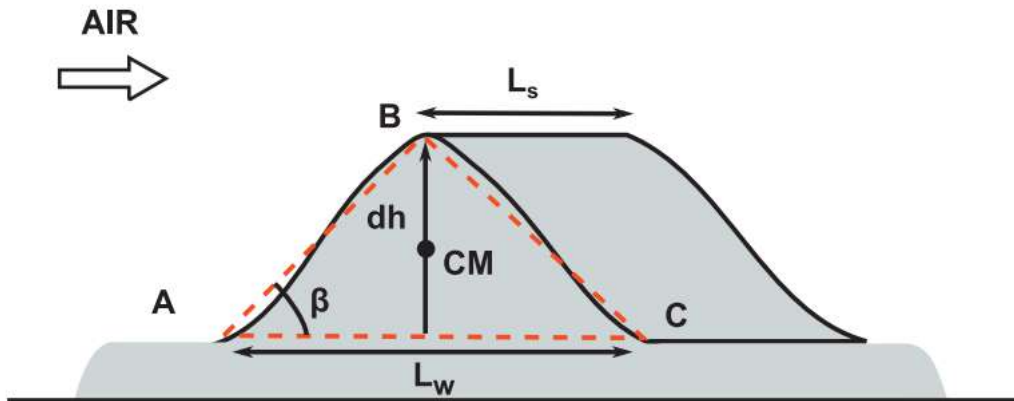


FIGURE 2.18 – Représentation d'une vague d'instabilité de film liquide avant le bord du préfilmeur dans le modèle SAM (issue de Bacharoudis et al. (2014)).

les mécanismes d'action des instabilités primaires de film et de la viscosité sur le régime de séparation, le modèle SAM de Bacharoudis et al. (2014) constitue à l'heure actuelle la meilleure approche disponible pour prédire la séparation du film liquide du préfilmeur.

Dans la suite, nous nous proposons de modifier la configuration étudiée dans les parties 2.4 et 2.5 pour calculer une configuration de marche. Les processus d'atomisation observés sur cette configuration de marche sont dans un premier temps analysés en regard des résultats

obtenus en 2.5 sur la configuration de Gepperth et al. (2012), puis comparés aux observations expérimentales de Bacharoudis et al. (2014) et confrontés au modèle SAM.

2.6.1 Configuration numérique

Afin d'étudier l'influence de l'épaisseur du préfilmeur sur le processus d'atomisation, nous avons fait le choix de modifier le moins possible le domaine de calcul et le maillage utilisé dans la simulation de la configuration de Gepperth et al. (2012). Les dimensions du domaine de la Figure 2.1 (droite) sont donc conservées. La géométrie présentée dans la Figure 2.19 est alors simplement obtenue en augmentant l'épaisseur du préfilmeur, modélisé à l'aide d'une méthodologie de frontières immergées, jusqu'en bas du domaine. Le point de fonctionnement étudié

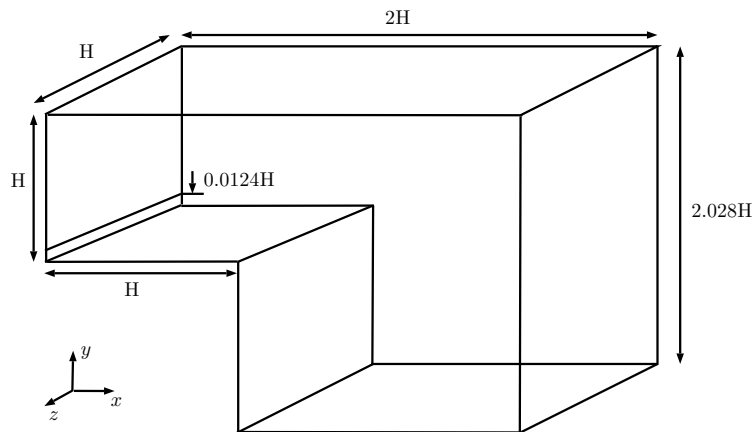


FIGURE 2.19 – Domaine de calcul considéré pour le calcul d'atomisation en bout de marche.

reste inchangé de sorte que la méthodologie développée dans la partie précédente pour réduire le coût du calcul reste valide. Les caractéristiques de l'écoulement sont rappelées dans le Tableau 2.4. Le maillage est choisi tel que $0.5\Delta x = \Delta y = 0.5\Delta z = 10 \mu\text{m}$ dans une zone d'épaisseur $0.25H$ selon la direction y comprenant le film liquide et une partie du préfilmeur. Dans l'idéal, on souhaiterait que cette zone comprenne toute l'épaisseur du préfilmeur comme dans le calcul précédent mais elle est réduite à $0.25H$ pour conserver un coût de calcul raisonnable. Hors de cette zone, les mailles sont étirées dans la direction y avec un taux de croissance de 1.03, comme illustré dans la Figure 2.20. Le maillage contient 118 millions d'éléments.

La simulation numérique est réalisée sur un temps physique de 23.3 ms allant du développement du film liquide jusqu'aux premiers processus d'atomisation primaire. En effet, pour des raisons de coût de calcul, seulement quelques événements d'atomisation primaire ont pu être simulés. Cela ne permet pas de réaliser des études quantitatives du processus d'atomisation mais offre cependant la possibilité de le caractériser qualitativement et de le comparer à celui observé dans la configuration précédente. Le coût total de cette simulation est de 1.43 millions d'heure sur les processeurs CPU Intel Skylake du supercalculateur Irene Joliot Curie (TGCC, GENCI, France).

La Figure 2.21 (gauche) présente une visualisation instantanée de l'atomisation en bout de préfilmeur en regard avec une image du cas étudié dans la partie 2.5 (droite). Les résultats sont discutés dans la partie suivante.

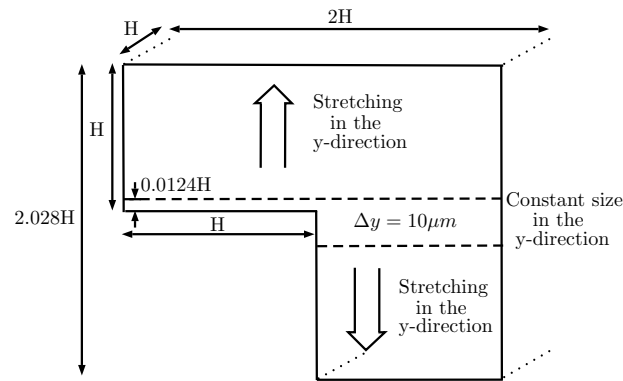


FIGURE 2.20 – Raffinement de maillage dans la direction y utilisé pour le calcul de la configuration de marche (Figure 2.19).

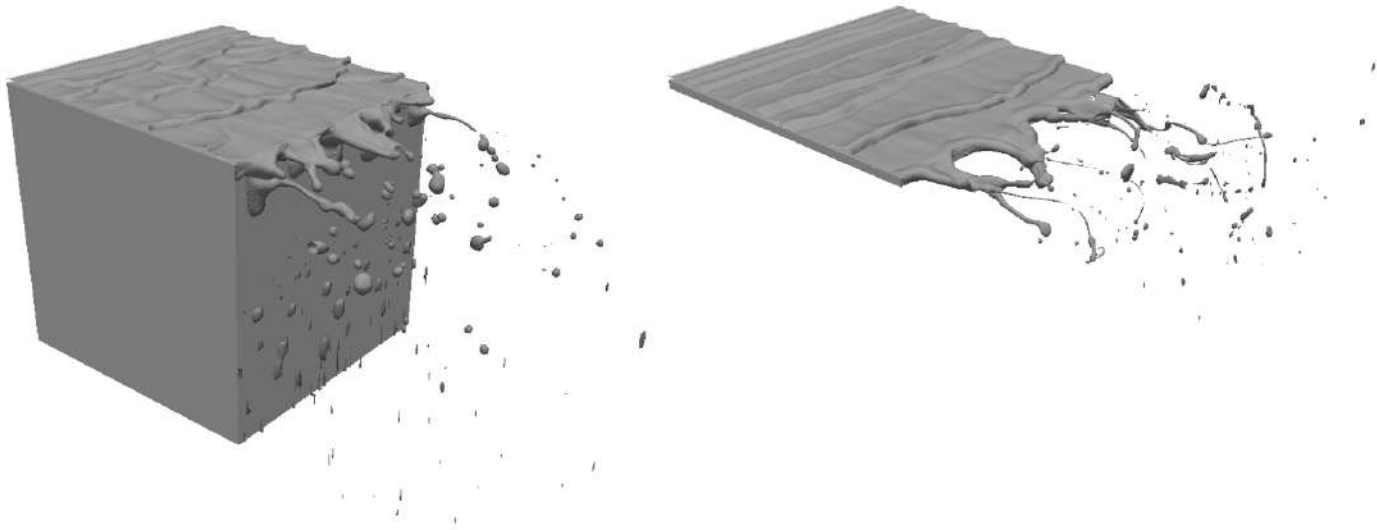


FIGURE 2.21 – Visualisation instantanée en vue de 3/4 de l'atomisation (champ d'interface PLIC). A gauche, la configuration de marche. A droite, la configuration simplifié du KIT.

2.6.2 Influence de la présence d'une marche sur la processus d'atomisation

La comparaison des deux configurations en Figure 2.21 montre que la dynamique de l'écoulement de la phase liquide est très différente dans le cas présent. La configuration de marche semble en effet conduire à la formation de gouttes de plus gros diamètres. Notons au passage la présence d'une zone sous la marche où les gouttes semblent étirées. Cette zone correspond au déraffinement important du maillage dont la présence est nécessaire pour préserver un coût de calcul acceptable. Les gouttes dans cette zone étant très déformée, elles ne sont pas considérées pour l'analyse. La Figure 2.22 présente une vue du dessus en trois instants de la zone d'atomisation de la configuration de marche et de celle précédemment étudiée, appelé configuration standard. Nous observons que les ligaments créés dans le cas de la marche sont de plus grandes tailles avec une pénétration axiale plus faible en aval du préfilmeur. Ces deux phénomènes sont

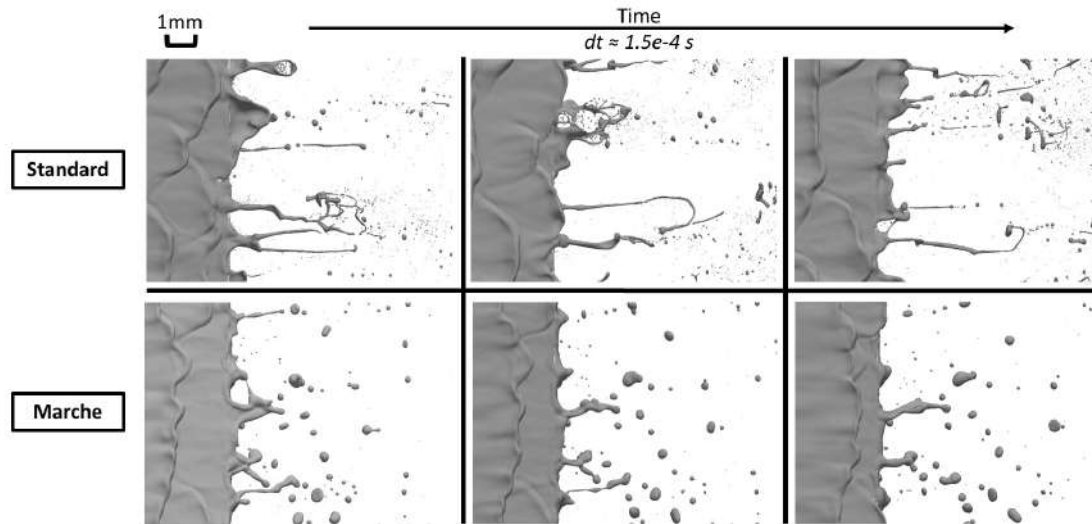


FIGURE 2.22 – Visualisation du processus d'atomisation à trois instants consécutifs (champ d'interface PLIC). En haute, le cas dérivé de la configuration du KIT, appelée cas standard. En bas, le cas de configuration de marche.

liés à un étirement moins prononcé des ligaments dans le configuration de marche. Ceci est attribué à l'absence d'écoulement sous le préfilmeur qui engendre une diminution des cisaillements gazeux subis par les ligaments et donc une élongation moindre. Les ligaments formés se déstabilisent ensuite dans les deux configurations sous l'effet des instabilités d'interface et des forces capillaires et s'atomisent selon un processus de Rayleigh-Plateau (Lord Rayleigh 1878). Cependant, les ligaments étant plus gros dans le cas de la marche, leur atomisation conduit mécaniquement à la formation de plus grosses gouttes.

L'absence d'écoulement gazeux sous le préfilmeur a également pour conséquence la disparition du mouvement de battement du film en aval du bord du préfilmeur produit par la formation d'allées de Von Kármán. Or, cette dynamique de battement est en partie à l'origine du phénomène d'atomisation de sacs ("bag breakup") observé dans la configuration standard. En effet, le battement amène la phase liquide dans la zone d'atomisation à pénétrer alternativement dans l'écoulement gazeux en dessus ou en dessous du préfilmeur. Lorsque c'est le cas, le liquide est localement soumis à la forte quantité de mouvement et au cisaillement du gaz formant des structures en forme de sac qui s'atomisent ensuite. La disparition de cette dynamique dans le cas de la marche engendre donc une disparition du phénomène d'atomisation de sacs.

Le processus d'atomisation par ligament décomposé en vue de côté dans la Figure 2.23 (gauche) montre qu'il est directement lié aux instabilités primaires du film liquide. Cette observation marque une vraie différence avec la configuration standard où la zone d'accumulation joue le rôle d'un réservoir de liquide qui décorrèle les instabilités du processus d'atomisation (Gepperth et al. 2012). Ici lorsqu'une instabilités primaires du film liquide arrive sur le bord d'atomisation, elle ne va pas ajouter sa masse à une zone d'accumulation située niveau du bord d'atomisation mais elle est projetée en aval sous l'influence de son inertie tout en restant accrochée au bord grâce aux effets de tension superficielle. Ce processus forme ainsi une membrane qui se transforme ensuite en ligament. Le ligament s'étire alors et fini par s'atomiser selon le processus de Rayleigh-Plateau (Lord Rayleigh 1878) évoqué précédemment. Comme le montre la Figure 2.23 (droite), ces observations sont similaires à celles réalisées expérimentalement par

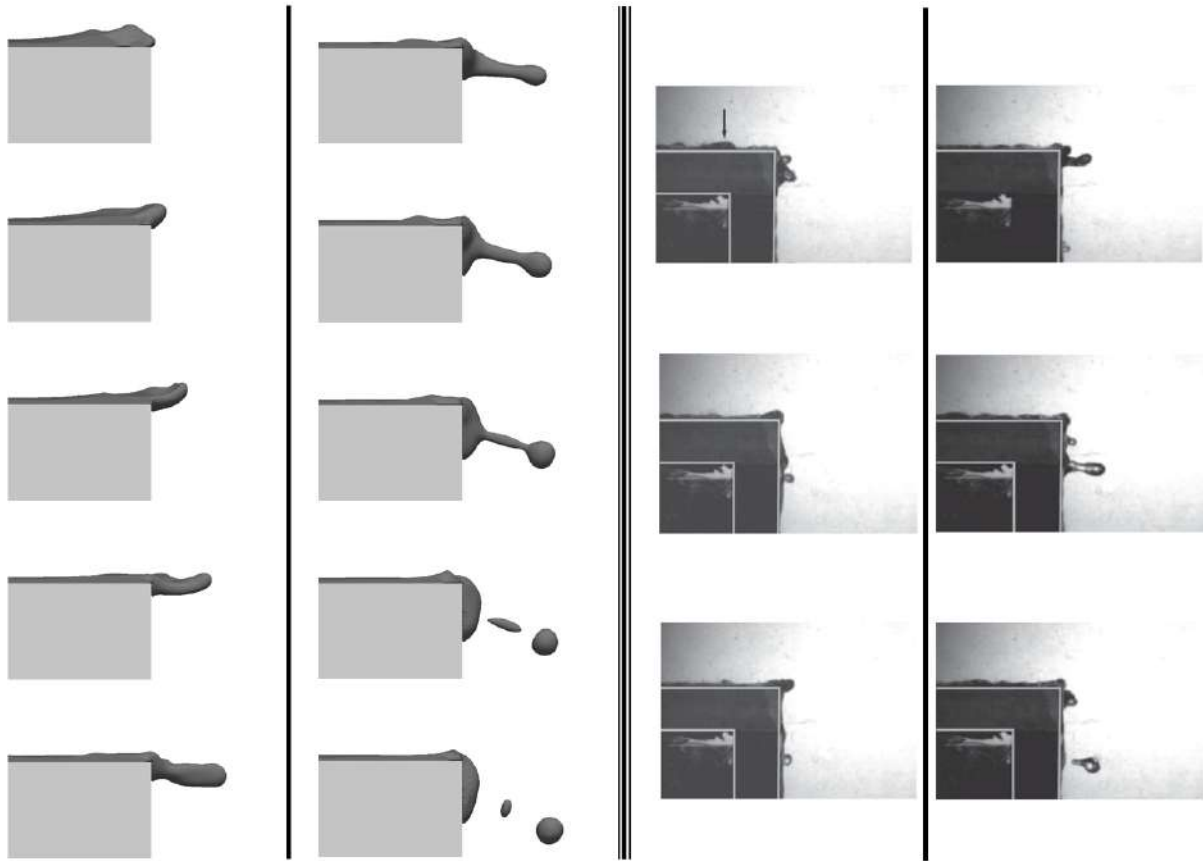


FIGURE 2.23 – Mécanisme de formation de gouttes dans le cas de la marche. A gauche, des images issues de la simulation (champ de PLIC). A droite, des images tirées des expériences de Bacharoudis et al. (2014) réalisées avec de l'eau dans de l'air. Le ratio de force FR du modèle SAM (Bacharoudis et al. 2014) est estimé à $FR = 1.52$ dans la simulation.

Bacharoudis et al. (2014) avec de l'eau et de l'air ce qui conforte nos résultats. Tout comme Bacharoudis et al. (2014), nous observons également que l'atomisation du film liquide est partielle. En effet, lorsqu'une vague d'instabilité arrive au niveau du bord du préfilmeur, elle peut simplement dans certains cas tourner autour du bord sans créer de gouttes. Ce phénomène correspond à un ratio de force $FR < 1$ dans le modèle SAM (eq. (2.28)). Il est mis en évidence dans la Figure 2.24 qui présente à gauche les résultats de simulation et à droite des visualisations tirées de Bacharoudis et al. (2014). Afin de vérifier l'applicabilité du modèle SAM (Bacharoudis et al. 2014) dans notre configuration, le ratio de force est calculé dans les cas des Figures 2.23 et 2.24. Comme l'écoulement du film liquide en amont est le même que dans la configuration précédente, la vitesse des vagues c_w est donc estimée à partir de l'inverse de la pente des lignes grises dans le diagramme spatio-temporel de Hovmöller (1949) (Figure 2.9) et vaut $c_w \approx 1.28$ m/s. La hauteur moyenne du film h_f est calculée en regardant de l'évolution de la hauteur de film 1 cm avant le bord d'atomisation et vaut $h_f = 105 \mu\text{m}$. La hauteur de la vague dh_f est directement déterminée à partir de la Figure 2.23 ou 2.24 tandis que sa largeur dans la direction de l'écoulement L_w est estimée en faisant l'hypothèse que la vague a une forme de triangle équilatéral de hauteur dh_f . La hauteur de la vague dh_f vaut respectivement $112 \mu\text{m}$ dans la Figure 2.23 et $60 \mu\text{m}$ dans la Figure 2.24. L'équation (2.29) conduit à $FR = 1.52$ pour le cas où la vague s'atomise et $FR = 0.46$ pour le cas où elle ne s'atomise pas. Ces résultats

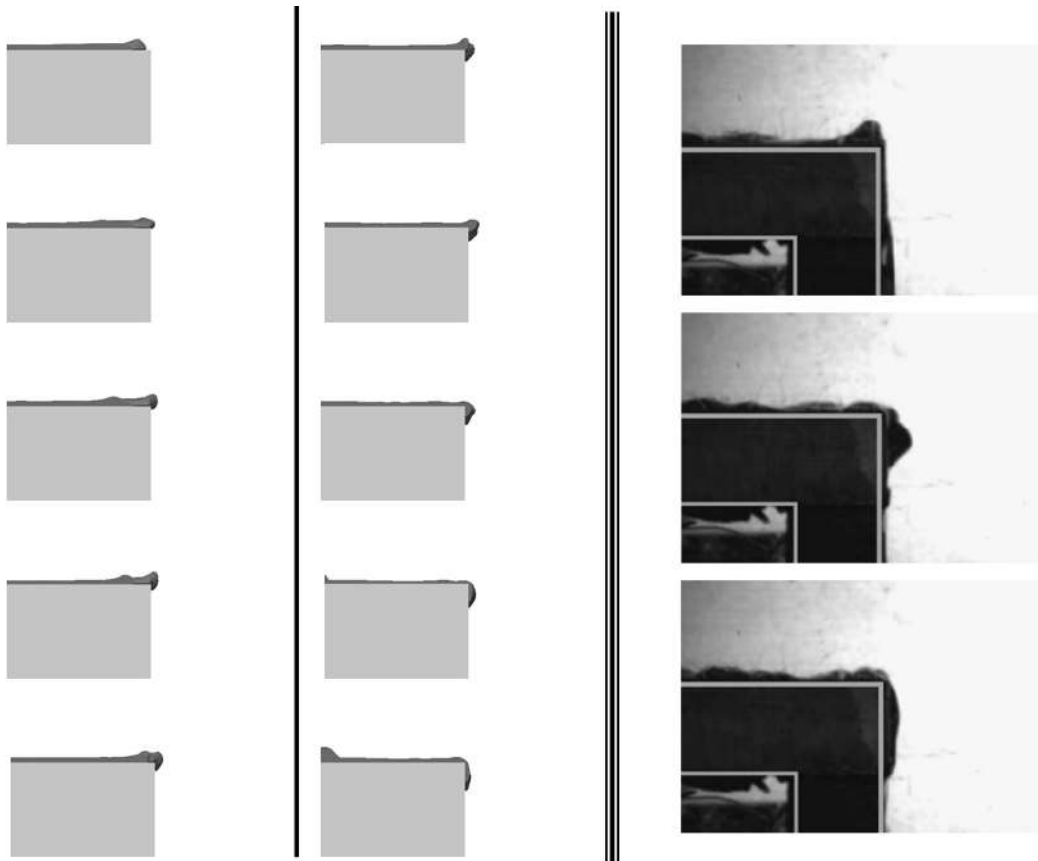


FIGURE 2.24 – Passage d'une vague d'instabilité au bord du préfilmeur sans atomisation. A gauche, des images issues de la simulation (champ de PLIC). A droite, des images tirées des expériences de Bacharoudis et al. (2014) réalisées avec de l'eau dans de l'air. Le ratio de force FR du modèle SAM (Bacharoudis et al. 2014) est estimé à $FR = 0.46$ dans la simulation.

sont conformes aux attentes et montrent que le modèle SAM est bien capable de rendre compte de l'atomisation ou non du film liquide dans notre configuration de marche. Nous en déduisons que les hypothèses du modèle s'appliquent et donc que le processus d'atomisation est piloté par le rapport entre l'inertie des vagues d'instabilité, qui tend à projeter le liquide en aval du bord d'atomisation, et la force de tension de surface, qui tend le liquide à se stabiliser au niveau du bord.

2.6.3 Conclusion de l'étude

La méthodologie développée et validée dans l'étude précédente a été appliquée pour réaliser une simulation haute fidélité de l'atomisation primaire d'un film liquide dans le cas d'une configuration de préfilmeur en forme de marche. L'analyse qualitative du processus d'atomisation primaire a montré que l'absence d'écoulement gazeux sous le préfilmeur modifie drastiquement l'atomisation primaire. Le processus d'atomisation par formation de ligaments est toujours bien présent mais la fragmentation de liquide par formation de sacs ("bag breakup") n'est plus observée. L'absence de ce dernier phénomène est attribuée à la disparition de la dynamique de battement de l'écoulement en aval du préfilmeur. Cette dynamique fait, en effet, pénétrer alternativement le liquide au niveau du bord d'atomisation dans l'écoulement gazeux en dessus et

en dessous du préfilmeur ce qui le soumet à la forte quantité de mouvement et au cisaillement du gaz et forme des structures en sacs. La disparition de l'écoulement gazeux en dessous du préfilmeur est également responsable, à travers la diminution du cisaillement du liquide par le gaz, d'un étirement moins prononcé des ligaments de liquide au niveau du bord d'atomisation. Ceci a pour conséquence de conduire à leur désintégration sous la forme de plus grosses gouttes. En outre, la décomposition du processus amenant à l'atomisation d'un ligament a permis d'observer que la fréquence et l'existence même de l'atomisation primaire sont directement liées aux instabilités primaires sur le film. Cette conclusion constitue une différence majeure avec la configuration de Gepperth et al. (2012), où la présence de l'écoulement en dessous du préfilmeur fait apparaître une zone d'accumulation de liquide au niveau de la lèvre du préfilmeur qui décorrèle les instabilités primaires du film du processus d'atomisation. Les résultats du calcul sont par ailleurs en très bon accord avec les observations expérimentales de Bacharoudis et al. (2014) réalisées sur une configuration similaire en utilisant de l'eau liquide. Ceci permet de valider l'analyse des phénomènes développée précédemment et de certifier la capacité de la méthodologie de calcul à prédire le comportement d'atomisation primaire dans une configuration de préfilmeur en forme de marche. Finalement, le modèle phénoménologique SAM, proposé par Bacharoudis et al. (2014), a montré sa faculté à décrire l'atomisation ou non d'une vague d'instabilité primaire arrivant au bord d'atomisation dans la simulation numérique. Il a donc été conclu que, conformément aux hypothèses du modèle SAM, l'occurrence d'un événement d'atomisation à l'arrivée du vague d'instabilité primaire du film au niveau du bord du préfilmeur est pilotée par une compétition entre l'inertie des vagues d'instabilité primaire et la force de tension de surface. La première force tend à projeter le liquide en aval du bord d'atomisation tandis que la seconde permet la stabilisation du liquide au niveau du bord.

2.7 Conclusion du chapitre

Ce chapitre propose une méthodologie pour réaliser des simulations numériques directes de configurations académiques d'injecteurs de type Airblast avec préfilmeur. Ce type de simulation est particulièrement intéressant puisqu'il offre la possibilité de comprendre et de caractériser finement la dynamique du film liquide et les processus d'atomisation primaire en jeu dans ces injecteurs. Pourtant, le coût de calcul qui y est associé est très élevé et reste, la plupart du temps, inabordable avec les moyens de calcul actuels. L'approche développée dans ce chapitre propose une méthodologie d'adimensionnalisation pour les rendre accessibles. Elle est basée sur l'identification et la conservation de quatre nombres sans dimension de première importance pour la dynamique de l'écoulement du film liquide et des processus d'atomisation primaire au niveau de la lèvre du préfilmeur. Ces nombres sont : le rapport des flux de quantité de mouvement M , le nombre de Weber basé sur la hauteur de film liquide We ainsi que les rapports des masses volumiques ρ_l/ρ_g et des viscosités dynamiques μ_l/μ_g . En conservant ces nombres, la longueur visqueuse δ_v , et donc le Reynolds de l'écoulement gazeux Re_H , sont augmentés pour permettre la simulation numérique directe de la turbulence dans l'écoulement tout en gardant un coût de calcul maîtrisé.

La méthode a ensuite été appliquée pour simuler la configuration académique conçue par Gepperth et al. (2012) pour étudier les phénomènes d'atomisation primaire dans les injecteurs aéronautiques de type Airblast. Elle est constituée d'un préfilmeur sur lequel se développe un film liquide entouré d'un écoulement gazeux à haute vitesse. Les comparaisons qualitatives et quantitatives de la dynamique du film liquide et des processus d'atomisation primaire ont

montré de très bons accords avec les expériences, permettant non-seulement de valider notre méthodologie de calcul mais aussi de mieux comprendre les phénomènes en jeu dans ce type de configuration.

La géométrie du préfilmeur a ensuite été modifiée pour obtenir une configuration de marche dans laquelle l'écoulement gazeux en dessous du préfilmeur n'est plus présent. Le processus d'atomisation primaire a été caractérisé et validé en regard de résultats expérimentaux obtenus sur d'autres configurations du même type. Il est alors apparu que la modification de la configuration a un impact très important sur le processus d'atomisation primaire du liquide. En particulier, l'absence d'écoulement en dessous du préfilmeur engendre la disparition du phénomène d'atomisation par formation de sac de liquide ("bag breakup") et, diminue l'étirement des ligaments qui se fragmentent en gouttes plus grosses. En outre, contrairement à la configuration précédente, où la formation d'un réservoir de liquide au niveau du bord du préfilmeur décorrèle la fréquence et l'existence des événements d'atomisation primaire de la dynamique du film liquide, ils sont ici directement liées à l'arrivée d'une instabilité primaire du film au niveau du bord d'atomisation.

L'étude de ces configurations a permis de mieux comprendre les dynamiques amenant à l'atomisation primaire du liquide dans les injecteurs de type Airblast avec préfilmeur. Cependant, même si la méthodologie développée a permis de rendre accessible et de réaliser des simulations numériques directes d'atomisation primaire de type Airblast, leurs coûts n'en restent pas moins très élevés. En effet, avec 1.2 millions d'heures CPU pour le premier calcul et 1.43 millions d'heures CPU pour le second, ces simulations numériques, pourtant de configurations académiques simples, sont largement au dessus des moyens des calculs traditionnels. Il est, ainsi, irréaliste d'envisager un tel calcul sur une configuration complète d'injecteur aéronautique industriel. L'enjeu est, donc, maintenant de mettre en place des méthodes à bas coût capables de reproduire la dynamique et les caractéristiques du spray. Ceci est l'objet du prochain chapitre.

Chapitre 3

Approche phénoménologique pour la simulation d'injecteurs de type Airblast avec Préfilmeur

3.1 Introduction

Bien que la simulation numérique directe offre une description très précise de la dynamique de la phase liquide et des processus d'atomisation, le coût de calcul associé ne permet pas d'envisager son utilisation pour simuler une configuration complète d'injecteur aéronautique industriel. Or, la connaissance des caractéristiques du spray ainsi que de sa dynamique sont très importantes pour la prédiction de la combustion et de la dynamique de la flamme. Kitano et al. (2016) ont, par exemple, établi un lien direct entre l'intensité d'une oscillation thermoacoustique et la taille des gouttes du spray. Le but de ce chapitre est donc de proposer une méthode moins coûteuse, basée sur des considérations phénoménologiques, pour prédire la dynamique et l'atomisation du liquide dans les injecteurs de type Airblast avec préfilmeur. Cette approche est développée dans l'optique d'être appliquée à la simulation aux grandes échelles de la combustion de sprays. Le but n'est donc pas de comprendre finement les phénomènes mais plutôt de décrire les caractéristiques principales du spray en fonction de la configuration de l'écoulement et de la géométrie de l'injecteur. Elle s'appuie sur un formalisme Lagrangien où la phase liquide est représentée sous la forme de gouttes sphériques transportées dans l'écoulement de manière discrète. Ce formalisme simplifié permet, d'une part, de prendre en compte la polydispersion des gouttes et, d'autre part, de modéliser simplement les interactions de la phase liquide avec l'écoulement gazeux et les différents phénomènes physiques qu'elle subit (atomisation, évaporation, etc.). Ces caractéristiques en font une méthode très utilisée pour étudier des problématiques liées à la combustion telles que des phénomènes d'allumage (Collin-Bastiani et al. 2018), des flammes stabilisées (Eckel et al. 2019) ou encore des instabilités thermoacoustiques (Tachibana et al. 2015, Lo Schiavo et al. 2020).

Comme nous l'avons vu dans la partie 1.4, le spray de gouttes généré par un injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur provient d'une succession d'étapes allant de l'injection initiale du liquide à son atomisation au niveau de la lèvre du préfilmeur, en passant par la formation et l'écoulement d'un film liquide. Ce chapitre s'intéresse tout particulièrement à la modélisation de l'écoulement du film liquide et de l'atomisation primaire. Après une rapide présentation du formalisme Lagrangien et de la méthode de prise en compte de la force de

traînée implémentés et validés dans le code AVBP par García (2009). Le modèle de film utilisé est, tout d'abord, détaillé, puis, le développement, la calibration dans le code AVBP et la sensibilité aux paramètres de l'écoulement du modèle d'atomisation primaire Automatic-PAMELA sont décrits. L'implémentation est, ensuite, validée par une série de calculs sur le cas de calibration. La méthode phénoménologique proposée est finalement appliquée pour simuler une configuration industrielle d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Un modèle d'atomisation secondaire est également ajouté pour ce calcul afin de prendre en compte la fragmentation des gouttes en aval de l'injecteur sous l'effet des forces aérodynamiques, permettant ainsi la comparaison quantitative des résultats avec des expériences.

3.2 Le formalisme Lagrangien

Dans l'approche Lagrangienne, la phase liquide est modélisée comme un ensemble de particules sphériques qui se déplacent dans l'espace sous l'influence de l'écoulement du gaz et agissent localement sur son écoulement via l'ajout de termes sources dans les équations de Navier-Stokes. Chaque particule est vue comme un point matériel. Sa position dans l'écoulement est donc définie par un jeu de coordonnées. Pour que cette représentation soit physiquement acceptable, le formalisme Lagrangien s'appuie sur deux hypothèses fondamentales. Tout d'abord, la phase liquide se présente sous la forme d'un spray dilué ce qui signifie en pratique que la fraction volumique locale de liquide dans l'écoulement est très faible. Cette hypothèse permet également de négliger la collision entre les particules. Ensuite, les forces de tension de surface doivent être prépondérantes par rapport aux forces qui déstabilisent la goutte. Notons que cette hypothèse est vraie dès l'instant où les particules sont très petites. Avec des diamètres moyens autour de $50 \mu\text{m}$, les sprays aéronautiques répondent à ce critère.

La trajectoire de chaque particule isolée est décrite au cours du temps par une équation de transport et une équation de conservation de la quantité de mouvement. La première équation se formule de la façon suivante :

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p \quad (3.1)$$

où \vec{u}_p et \vec{x}_p sont respectivement le vecteur vitesse et le vecteur position de la particule. Il convient de souligner que l'hypothèse de particules sphériques permet de négliger la rotation des particules. Seuls les phénomènes de translation sont donc ici pris en compte.

La conservation de la quantité de mouvement de la particule s'écrit à l'aide d'un bilan de forces :

$$\frac{dm_p \vec{u}_p}{dt} = \sum \vec{F}_{ext} \quad (3.2)$$

où m_p et $\sum \vec{F}_{ext}$ sont respectivement la masse de la particule et la somme des forces extérieures agissant sur la particule. L'équation (3.2) est également appelée "équation de Basset-Boussinesq-Oseen" en références aux travaux de Basset (1888), Boussinesq (1903) et Osen (1927) qui ont pour la première fois dérivé une expression analytique des forces agissant sur une goutte en chute libre. Ces travaux ont ensuite été étendus par Tchen (1947) au cas d'une sphère rigide non-uniforme. Ces derniers ont enfin été repris et corrigés par Maxey & Riley (1983).

Ces différentes études ont montré que les principales forces extérieures agissant sur une particule isolée sont les suivantes :

- la force de traînée \vec{F}_D
- la force engendrée par le gradient de pression \vec{F}_{press}

- la masse ajoutée \vec{F}_{am}
- la force de Basset \vec{F}_B
- la force de gravité $\vec{F}_g = m_p \vec{g}$

Lorsque la masse volumique de la particule est très supérieure à celle du fluide (typiquement une particule d'eau s'écoulant dans de l'air $\frac{\rho_p}{\rho_g} \approx 10^3$), Elghobashi & Truesdell (1992) ont montré que les forces de traînée et de gravité sont prédominantes. L'équation (3.2) peut alors se simplifier en :

$$\frac{dm_p \vec{u}_p}{dt} = \vec{F}_D + m_p \vec{g} \quad (3.3)$$

Seule l'expression de la force de traînée est discutée dans la suite mais le lecteur intéressé pourra se référer à la thèse de García (2009) pour obtenir l'expression des autres forces.

Pour finir, il est intéressant de remarquer que l'équation 3.3 peut se reformuler de la façon suivante :

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (\vec{u}_g - \vec{u}_p) + \vec{g} \quad (3.4)$$

τ_p correspond au temps caractéristique de l'accélération de la particule défini (à partir de l'expression de \vec{F}_D eq. (3.7)) par la relation :

$$\tau_p = \frac{4\rho_p d_p}{3\rho_g C_D} \frac{1}{\|\vec{u}_g - \vec{u}_p\|} \quad (3.5)$$

où d_p est le diamètre de la particule et C_D représente le coefficient de traînée de la particule. Le comportement de la particule dans l'écoulement peut alors être caractérisé par le rapport de τ_p avec le temps convectif de l'écoulement τ_f . Ce rapport est appelé nombre de Stokes :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad (3.6)$$

Si $St \gg 1$ alors la particule a un comportement inertiel. Elle est très peu sensible aux variations de vitesse dans l'écoulement et suit une trajectoire dictée par son inertie. En revanche, si $St \ll 1$ la particule se comporte comme un traceur et sa trajectoire suit les lignes de courant de l'écoulement gazeux.

3.3 Modélisation de la force de traînée

Comme évoqué dans la partie précédente, la traînée induite est la principale force subie par une particule isolée entourée d'un écoulement gazeux. Faisant l'hypothèse que la particule est plongée dans un champs uniforme de pression, Stokes (1851) a montré que cette force peut s'écrire en fonction d'un coefficient de traînée C_D et de la vitesse relative entre la particule et le gaz :

$$\vec{F}_D = \frac{1}{2} \rho_g C_D \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\| (\vec{u}_g - \vec{u}_p) A_p \quad (3.7)$$

où ρ_g est la masse volumique de la particule, \vec{u}_p sa vitesse, A_p sa surface et \vec{u}_g la vitesse du gaz environnant.

De nombreuses relations pour le coefficient de traînée C_D ont été proposées dans la littérature et sont issues de travaux théoriques ou expérimentaux. Celle développée originellement

par Stokes (1851) se base sur l'hypothèse d'une particule solide et isolée à $Re_p \ll 1$ en l'absence de phénomènes d'évaporation et s'exprime :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \quad (3.8)$$

Dans l'équation (3.8), Re_p est le nombre de Reynolds particulaire. Il est défini comme suit :

$$Re_p = \frac{d_p \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\|}{\nu_g} \quad (3.9)$$

où d_p est le diamètre de la particule sphérique et ν_g la viscosité cinématique du gaz. Osen (1927) a ensuite établi une forme qui prend en compte l'inertie de la particule et qui est valide lorsque le Reynolds de la particule (eq. (3.9)) est inférieur à 5.

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{3}{16} Re_p^{0.687} \right) \quad (3.10)$$

D'autres auteurs ont également dérivé des relations pour le coefficient de traînée. Quelques unes sont explicitées ci-dessous à titre d'exemple :

— Clift (Clift et al. 1978) :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0.1935 Re_p^{0.6305} \right) \quad Re_p \leq 1000 \quad (3.11)$$

— Rudinger (Clift et al. 1978) :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{1}{6} Re_p^{2/3} \right) \quad Re_p \leq 1000 \quad (3.12)$$

— White (Clift et al. 1978) :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} + \frac{6}{1 + Re_p^{0.5}} + 0.4 \quad Re_p \leq 200 \quad (3.13)$$

— Mulholland (Mulholland et al. 1988) :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0.11 Re_p^{0.687} \right) \quad 25 \leq Re_p \leq 300 \quad (3.14)$$

— Virepinte (Virepinte 1999) :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0.12 Re_p^{0.687} \right) \quad 20 \leq Re_p \leq 120 \quad (3.15)$$

Toutefois, la forme la plus utilisée est la formulation empirique de Schiller & Naumann (1935) dérivée comme une correction de la formule de Stokes (1851) (eq. (3.8)).

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0.15 Re_p^{0.687} \right) \quad Re_p < 1000 \quad (3.16)$$

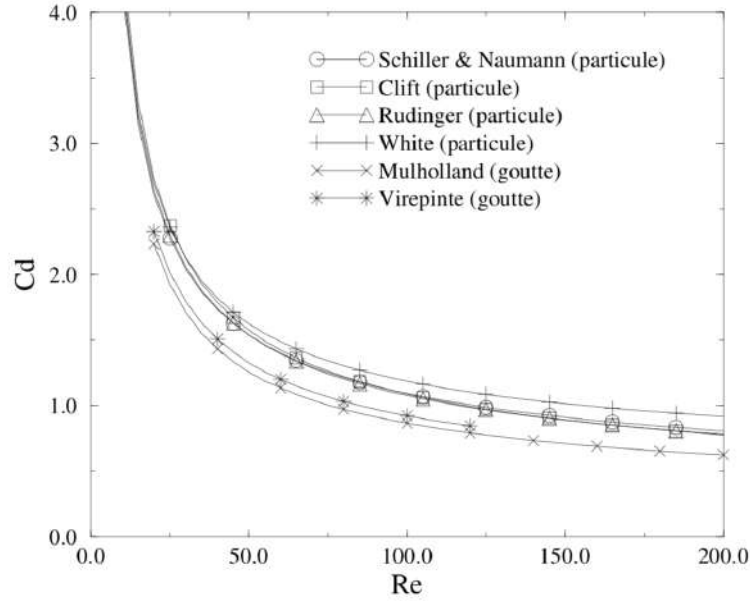


FIGURE 3.1 – Comparaison de différentes corrélations du coefficient de traînée pour une particule isolée. La figure est issue de Massol (2004).

La Figure 3.1 montre que toutes ces relations traduisent un comportement très similaire. Relevons cependant que les expressions de Mulholland et al. (1988) et de Virepinte (1999) donnent des résultats légèrement en dessous des autres. Ceci est dû au fait que ces corrélations considèrent des gouttes liquides et non des particules solides. Or, la présence de recirculation internes de fluide induites par la traînée d'interface modifie légèrement le comportement de la traînée.

Dans cette thèse, les gouttes sont considérées comme suffisamment petites pour être assimilées à des particules solides. Leur coefficient de traînée est donc déterminé à l'aide de la corrélation de Schiller & Naumann (1935) (eq. (3.16)). Notons pour finir que les corrélations présentées dans cette partie ne tiennent pas compte de la modification de traînée induite par la présence d'autres particules autour. Dans ces conditions, l'hypothèse de phase liquide dispersée doit être respectée scrupuleusement. Pour le lecteur intéressé, l'ajout des interactions entre particules est discuté par Massol (2004).

3.4 Traîtement du couplage entre les deux phases

L'impact de la traînée de la phase liquide sur l'écoulement gazeux est pris en compte par l'intermédiaire de termes de transfert ajoutés comme des termes sources aux équations de conservation de la quantité de mouvement (eq. (1.43)) et de l'énergie totale (eq. (1.44)). Le terme source $\vec{S}_{qdm}^{l \rightarrow g}$ lié à l'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\vec{S}_{qdm}^{l \rightarrow g} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{p=1}^{N_p} \Psi_p \left(-m_p \vec{F}_{D,p} \right) \quad (3.17)$$

Le terme source $S_E^{l \rightarrow g}$ ajouté à l'équation de conservation de l'énergie totale se formule :

$$S_E^{l \rightarrow g} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{p=1}^{N_p} \Psi_p \left(-m_p \vec{F}_{D,p} \cdot \vec{u}_p \right) \quad (3.18)$$

Dans les équations (3.17) et (3.18), ΔV correspond au volume de contrôle centré sur le noeud du maillage (volume dual) et N_p est le nombre total de particules contenues dans celui-ci. Ψ_p est une fonction d'interpolation utilisée pour répartir l'action de la particule p sur l'écoulement gazeux entre les différents sommets k de la cellule du maillage à laquelle elle appartient. Dans le solveur AVBP, elle a été définie par García (2009) à partir de l'inverse des distances l_k entre la particule et les sommets k . La Figure 3.2 illustre la situation considérée. Le poids d'interpolation $\Psi_{p,k}$ associé à un noeud du maillage, qui est également le sommet k de l'une de ses cellules environnantes, est calculé par la relation suivante :

$$\Psi_{p,k} = \frac{1/l_k}{\sum_{k=1}^{N_v} 1/l_k} \quad (3.19)$$

où N_v est le nombre de sommet de la cellule.

Notons que les cas considérés dans cette thèse sont réalisés à pression atmosphérique et température ambiante ce qui permet de négliger l'évaporation des gouttes dans les calculs. Il est cependant possible de prendre en compte ce phénomène en utilisant par exemple le modèle de Spalding (1953) ou celui proposé par Abramzon & Sirignano (1989) pour déterminer les termes de transferts de masse et d'énergie. Un terme source apparaît alors pour les équations de conservation de la masse et des espèces et les termes sources (3.17) et (3.18) sont modifiées pour inclure les changements de masse et d'énergie lié à l'évaporation.

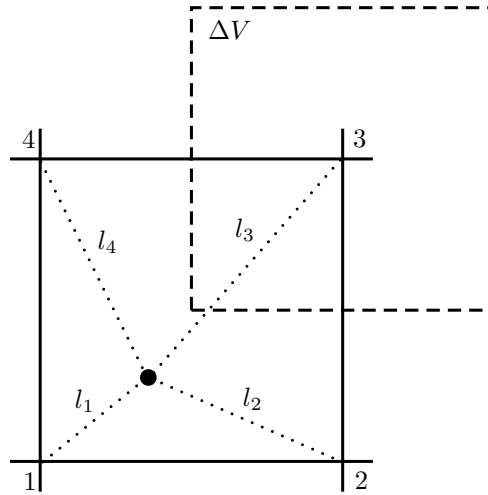


FIGURE 3.2 – Exemple d'interpolation de la contribution d'une particule aux termes sources définis aux sommets d'une cellule.

3.5 Modèle d'écoulement de film

La modélisation du film liquide est de première importance pour la simulation des injecteurs de type Airblast avec préfilmeur puisqu'il est le principal responsable de l'atomisation primaire

en bout de lèvres. Sa modélisation par une approche Lagrangienne n'est pourtant pas aisée puisque la phase liquide n'est plus constituée d'un ensemble de gouttes sphériques dispersées mais prend la forme d'une couche de liquide mince dont la dynamique obéit aux équations de Saint-Venant. Pour contourner ce problème, les modèles Lagrangiens proposent d'assimiler le film à un ensemble de particules de volume V_p dont la vitesse \vec{u}_p correspond à celle qu'aurait localement un film liquide mince de hauteur h_f tel que :

$$h_f = \frac{1}{A} \sum_p V_p \quad (3.20)$$

où A est la surface en paroi de la cellule qu'elles occupent. La dynamique des particules peut alors être calculée à partir de modèles issus d'une reformulation discrète de l'équation de conservation de la quantité de mouvement de Saint-Venant. Le modèle utilisé dans cette thèse a été proposé initialement par O' Rourke & Amsden (1996) puis amélioré pour y ajouter l'influence du gradient de pression dans O' Rourke & Amsden (2000). La vitesse de chaque particule p du film \vec{u}_p^n à l'itération n y est calculée à partir de sa vitesse au pas de temps précédent \vec{u}_p^{n-1} selon l'équation de conservation de la quantité de mouvement suivante :

$$\rho_l h_f \frac{\vec{u}_p^n - \vec{u}_p^{n-1}}{\Delta t} + h_f \nabla_s p_f = \tau_{s,g} \vec{t} - \mu_l \frac{\vec{u}_p^n - \vec{u}_w}{h_f/2} + \dot{P}_{imp} - \dot{M}_{imp} \vec{u}_p^n + F_n \vec{n} + \rho_l h_f \vec{g} \quad (3.21)$$

où, ρ_l et μ_l représentent la masse volumique et la viscosité dynamique du liquide. \vec{g} est l'accélération de pesanteur. \vec{t} et \vec{n} sont des vecteurs unitaires respectivement tangent à la paroi dans la direction de l'écoulement et normal à cette dernière. Le terme $\tau_{s,g}$ rend compte du cisaillement du gaz sur le film liquide. Basé sur l'hypothèse d'un film liquide mince (i.e. d'épaisseur négligeable devant l'écoulement gazeux), ce terme est en pratique assimilé au frottement du gaz à la paroi en l'absence de film liquide. Le terme \vec{u}_w est la vitesse de déplacement de la paroi dans le cas où elle n'est pas nulle. \dot{M}_{imp} est le terme source de masse du liquide engendré par les particules impactant la paroi et arrivant dans le film liquide.

$$\dot{M}_{imp} = \frac{1}{A \Delta t} \sum_{p=p_{imp}} \rho_l V_p \quad (3.22)$$

$\nabla_s p_f$ est le gradient surfacique de pression dans le film dont la pression p_f est supposée être uniquement causée par l'impact des particules.

$$p_f = \dot{M}_{imp} \vec{u}_w \cdot \vec{n} - \dot{P}_{imp} \cdot \vec{n} \quad (3.23)$$

\dot{P}_{imp} est le terme source de quantité de mouvement associé aux particules impactant la paroi et arrivant dans le film liquide.

$$\dot{P}_{imp} = \frac{1}{A \Delta t} \sum_{p=p_{imp}} \rho_l \vec{u}_p V_p \quad (3.24)$$

Finalement, F_n représente les forces agissant normalement sur le film liquide. En supposant que la vitesse du film est nulle dans la direction normale à la paroi, ce terme est exprimé par la relation :

$$F_n = \left[\dot{M}_{imp} \vec{u}_w - \frac{\rho_l h_f}{\Delta t} (\vec{u}_p^n - \vec{u}_w) - \vec{S} \right] \cdot \vec{n} \quad (3.25)$$

avec,

$$\vec{S} = \dot{P}_{imp} - h_f (\nabla_s p_f) + \rho_l h_f \vec{g} \quad (3.26)$$

Amélioration du calcul de la hauteur de film liquide

Comme expliqué dans la partie précédente, la hauteur locale du film liquide est déterminée par le rapport entre le volume des particules qui constituent localement le film liquide et la surface en contact avec la paroi de la cellule auxquelles elles appartiennent (eq. (3.20)). Cette expression offre en effet une bonne estimation de la hauteur de film lorsque le volume des particules est suffisant pour mouiller l'intégralité de la surface en paroi. Cependant, lorsque ce n'est pas le cas comme par exemple dans les cellules situées aux bords du film liquide, l'hypothèse d'une mouillabilité intégrale de la surface par le liquide devient fautive et la formule (3.20) sous-estime grandement la hauteur locale du film. La Figure 3.3 présente à droite une situation où la hauteur de film est estimée correctement et à gauche une configuration défailante. Notons que cette erreur est accentuée sur les maillages grossiers où la surface des cellules en paroi est plus grande.

Bien que limitée à certaines cellules du film liquide, cette erreur d'estimation est très problématique car elle a un fort impact sur sa dynamique. En effet, lorsque l'écoulement du film est à l'équilibre et que la gravité est négligée, la vitesse d'équilibre des particules u_p^{eq} , donnée par l'équation (3.21) lorsque $u_p^{n+1} = u_p^n$, est directement liée à cette hauteur via la relation suivante :

$$\vec{u}^{eq} = \frac{\tau_{s,g} \vec{t}}{2\mu_l} h_f \quad (3.27)$$

L'équation (3.27) montre que si la hauteur du film liquide tend vers 0 alors la vitesse des particules devient nulle occasionnant localement l'arrêt non-physique du film liquide.

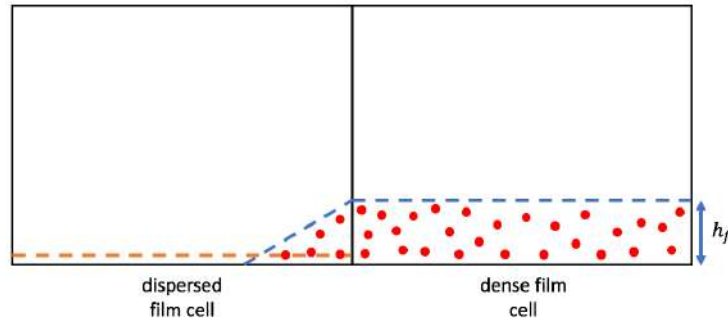


FIGURE 3.3 – Vue schématique, à droite, d'une configuration où la hauteur de film est estimée correctement par l'équation (3.20) et, à gauche, d'une autre où la formule (3.20) conduit à une hauteur de film fautive.

Pour éviter cette situation, nous avons donc amélioré l'estimation de la hauteur du film liquide en assimilant localement celle-ci à la hauteur qu'aurait une goutte de volume équivalent à l'équilibre contre une paroi. Cette goutte a la forme d'une lentille (Figure 3.4, gauche) dont la hauteur est calculée à l'aide de l'équation (3.28).

$$h_f = R_0 (1 - \cos(\theta_s)) \sqrt{\frac{\pi}{2(\theta_s - \sin(\theta_s) \cos(\theta_s))}} \quad (3.28)$$

où θ_s représente l'angle de contact de la goutte avec la paroi. Sa valeur est arbitrairement fixée à 60° ce qui correspond à une mouillabilité partielle de la paroi. R_0 correspond au rayon

d'une goutte à l'équilibre sur la paroi avec un angle de contact de 90° (Figure 3.4, droite). En considérant une goutte équivalente de volume V_p , il s'exprime :

$$R_0 = \left(\frac{3}{2} \pi \sum_p V_p \right)^{1/3} \quad (3.29)$$

La hauteur du film liquide utilisée dans chaque cellule du maillage correspond à la valeur la plus grande donnée par les formules (3.20) et (3.28).

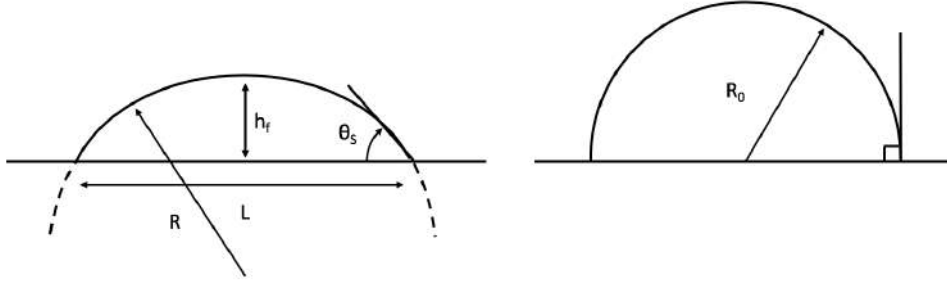


FIGURE 3.4 – Schéma d'une goutte à l'équilibre sur une paroi pour deux angles de contacts θ_s différents. A gauche, $\theta_s < 90^\circ$. A droite, $\theta_s = 90^\circ$.

3.6 Les modèles phénoménologiques pour l'atomisation de type Airblast avec préfilmeur

La prise en compte de l'atomisation primaire du liquide au niveau de la lèvre du préfilmeur est maintenant discutée. Une revue de quelques modèles phénoménologiques existants est tout d'abord réalisée. Puis, le développement, la calibration et la validation d'un modèle Automatic-PAMELA sont ensuite détaillés.

3.6.1 Revue de quelques modèles existants

Le modèle de Inamura et al. (2012)

A la suite d'expériences conduites sur l'atomisation de type Airblast d'un film liquide d'eau dans différentes conditions de débit liquide et de vitesse de gaz, Inamura et al. (2012) ont proposé un modèle phénoménologique qui lie les instabilités de film liquide à la taille des gouttes formées lors de l'atomisation. Le mécanisme considéré est présenté en Figure 3.5. Une vague d'instabilité de longueur d'onde λ_1 se développe à la surface du film liquide selon un processus de Kelvin-Helmholtz. Elle est accélérée par le gaz ce qui engendre l'apparition d'une instabilité de Rayleigh-Taylor de longueur d'onde λ_2 sur la crête de la vague. Lorsque la vague arrive au niveau du bord d'atomisation, elle se désintègre selon le processus d'atomisation par formation de sac (mis en évidence dans la partie 2.5.2). Les petites gouttes formées par l'explosion du sac sont négligées dans le modèle qui se concentre sur l'atomisation du bord du sac ("rim" dans la Figure 3.5). La structure du bord du sac est assimilée dans le modèle à trois cylindres de diamètre d_1 disposés en forme de "U". Chaque cylindre se désintègre en gouttes de diamètre d .

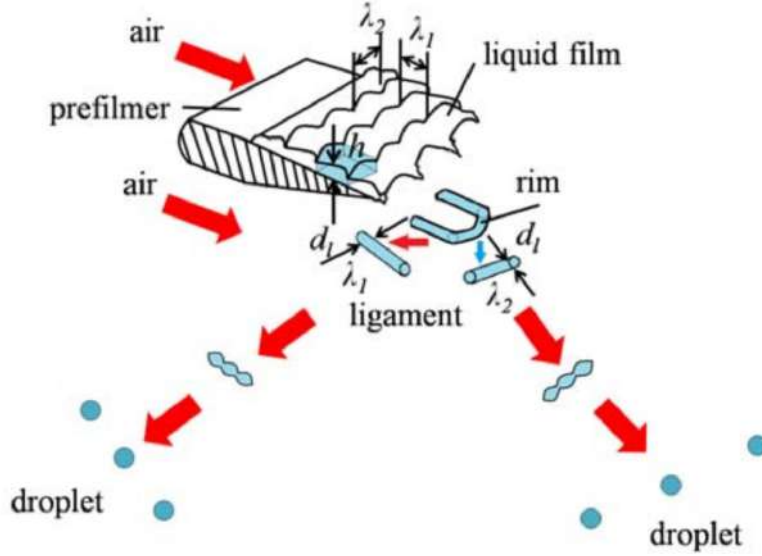


FIGURE 3.5 – Mécanisme d'atomisation primaire proposé par Inamura et al. (2012).

Les relations utilisées par Inamura et al. (2012) pour exprimer les longueurs d'onde λ_1 et λ_2 sont les suivantes :

$$\lambda_1 = C_1 \delta_g \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3.30)$$

$$\lambda_2 = 2\pi \delta_g \sqrt{\frac{6C_1 C_2}{C_d} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_g (U_g - U_l)^2 \delta_g}}} \quad (3.31)$$

où ρ_l et U_l sont la masse volumique et la vitesse moyenne du liquide, et ρ_g et U_g celles du gaz. δ_g est l'épaisseur de couche limite au-dessus du film liquide au niveau du bord d'atomisation. σ représente le coefficient de tension de surface. C_1 et C_2 sont des constantes du modèle. Leurs valeurs ont été établies à 1.6 et 0.25 par Inamura et al. (2012). C_d représente un coefficient de traînée et vaut 2.01 (Inamura et al. 2012). Le diamètre d_l des cylindres est alors déterminé par la relation :

$$d_l = 2 \sqrt{\frac{\lambda_1 \lambda_2 h_f}{\pi (2\lambda_1 + \pi \lambda_2 / 2)}} \quad (3.32)$$

Le diamètre moyen des gouttes d_d est ensuite exprimé par la relation (3.33) établie par Dombrowski & Johns (1963) à partir de la théorie développée par Weber (1931) :

$$d_d = 1.88 d_l (1 + 3 Oh)^{1/6} \quad (3.33)$$

Oh est un nombre d'Ohnesorge. Il fait état du rapport entre des forces visqueuses dans le liquide, la tension de surface et les forces d'inertie.

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma d_l}} \quad (3.34)$$

où μ_l est la viscosité dynamique du liquide. En se basant sur l'étude de Marmottant & Villermaux (2004), Inamura et al. (2012) proposent de décrire la distribution numérique $f_0(x)$ de

tailles de gouttes via la formule suivante :

$$f_0(x = d/d_d) = \frac{n^n}{\Gamma(n)} x^{n-1} e^{-nx} \quad (3.35)$$

où n est une constante comprise entre 2 et 4 et Γ représente la fonction Gamma.

Bien que ce modèle néglige totalement la présence d'atomisation par formation de ligament, Inamura et al. (2012) ont montré qu'il permet en le combinant au modèle d'atomisation secondaire TAB (O'Rourke & Amsden 1987) d'obtenir, dans les cas de faible débit de liquide, une bonne prédiction des diamètres moyens de Sauter 50 μm en aval du bord d'atomisation. Ils sont cependant légèrement plus faibles que ceux mesurés pour les cas à fort débit de liquide. Notons que la distribution de tailles de gouttes générée par le modèle n'a pas été comparée à la distribution expérimentale dans cette étude. Dans sa version originale, ce modèle ne comporte pas d'estimation du temps caractéristique du processus d'atomisation primaire. Or, cette grandeur est importante pour prendre en compte l'inertie du phénomène face à un changement des conditions de l'écoulement comme dans le cas d'écoulements oscillants. Pour répondre à ce problème, Chaussonnet et al. (2017) proposent de faire l'hypothèse que le temps caractéristique τ_{tot} du processus d'atomisation primaire est la somme des temps caractéristiques d'atomisation d'un cylindre τ_{cyl} et d'un ligament τ_{liga} . Le premier est issu de l'étude de stabilité linéaire réalisé par Weber (1931) :

$$\tau_{cyl} \approx -2.545 \log(\eta_0) \sqrt{\rho_l d_1^3 / 8 / \sigma} \quad (3.36)$$

où η_0 est une constante liée à la perturbation initiale du cylindre qui est fixée à 0.1 dans l'étude de Chaussonnet et al. (2017). Le deuxième est tiré des résultats expérimentaux de Marmottant & Villermaux (2004) :

$$\tau_{liga} \approx \sqrt{\rho_l d_d^3 / \sigma} \quad (3.37)$$

Le temps caractéristique total de l'atomisation primaire s'exprime alors :

$$\tau_{tot} = -2.545 \log(\eta_0) \sqrt{\rho_l d_1^3 / 8 / \sigma} + \sqrt{\rho_l d_d^3 / \sigma} \quad (3.38)$$

Le modèle de Eckel et al. (2013)

En se basant sur les expériences de Gepperth et al. (2012), Eckel et al. (2013) ont proposé un mécanisme d'atomisation prenant en compte à la fois les processus d'atomisation par formation de sac et par ligament. Comme le modèle de Inamura et al. (2012), ce mécanisme, présenté en Figure 3.6, fait l'hypothèse que le processus d'atomisation primaire est piloté par les vagues d'instabilité qui se développent à la surface du film liquide. Les longueurs d'onde des vagues longitudinales λ_{stream} et transversales λ_{span} sont exprimées par les relations suivantes :

$$\lambda_{stream} = \delta_g \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3.39)$$

$$\lambda_{span} = 2 \sqrt{\frac{\Lambda_l \lambda_{stream}}{\pi U_c}} \quad (3.40)$$

où Λ_l est le débit volumétrique 2D du film liquide et U_c représente la vitesse de convection de la vague d'instabilité longitudinale.

$$U_c = U_g \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad (3.41)$$

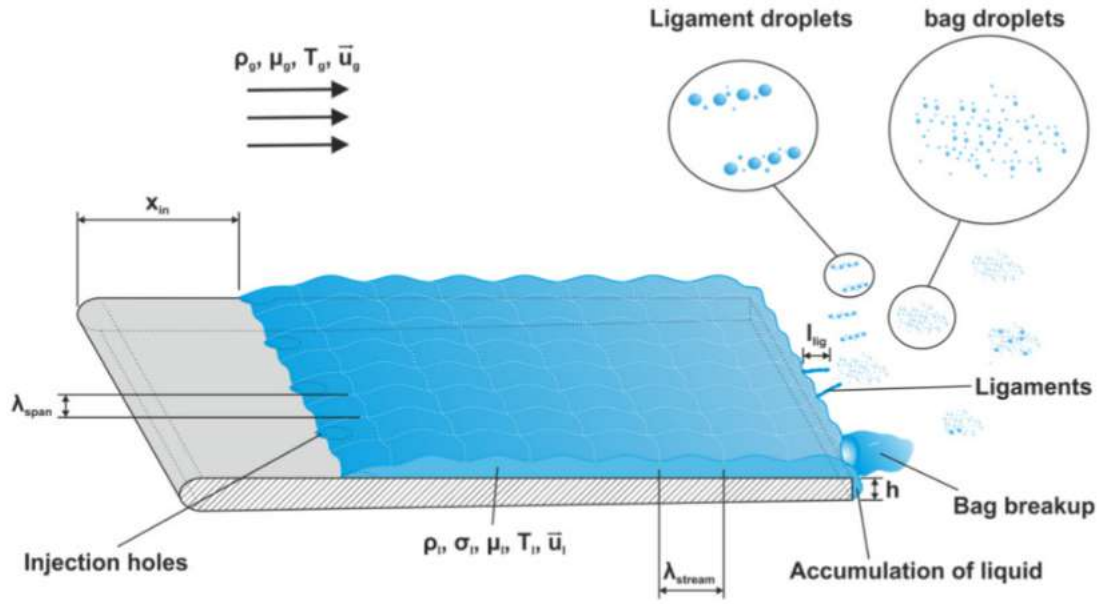


FIGURE 3.6 – Mécanisme d'atomisation primaire proposé par Eckel et al. (2013).

Eckel et al. (2013) font l'hypothèse que le volume de liquide V_0 contenu dans les vagues d'instabilités longitudinales et transversales est à l'origine de la formation d'une goutte de diamètre équivalent d_0 qui est ensuite atomisée soit en formant un sac ou soit en s'étirant pour créer un ligament. Le volume V_0 s'écrit alors :

$$V_0 = \Lambda_l \lambda_{stream} \lambda_{span} / U_c \quad (3.42)$$

Et, le diamètre d_0 de la goutte équivalente vaut :

$$d_0 = \sqrt[3]{6V_0/\pi} \quad (3.43)$$

Les diamètres moyens de Sauter D_{32} et du centre de masse D_{30} sont donnés pour le processus d'atomisation par formation de sac par :

$$D_{32,bag} = 0.044 d_0 \quad (3.44)$$

$$D_{30,bag} = 1.04 D_{32,bag} \quad (3.45)$$

et pour celui par ligament par :

$$D_{32,liga} = 0.32 \frac{\sigma}{\rho_g (U_l - U_g)^2} [We_{d_0} (t_{init}^* - t_{liga}^*)]^{2/3} \quad (3.46)$$

$$D_{30,liga} = C_1 D_{32,liga} \quad (3.47)$$

Dans l'équation (3.46), We_{d_0} est un nombre de Weber basé sur le diamètre d_0 de la goutte équivalente.

$$We_{d_0} = \frac{\rho_g U_g^2 d_0}{\sigma} \quad (3.48)$$

t_{init}^* et t_{liga}^* sont des temps caractéristiques sans dimension respectivement liés à la formation du ligament et son atomisation. Ils sont donnés par les formules suivantes :

$$t_{init}^* = \frac{t_{init}}{t^*} \quad (3.49)$$

Et,

$$t_{liga}^* = \frac{t_{liga}}{t^*} = \frac{C_3}{\chi} \quad (3.50)$$

où C_3 est une constante sans dimension égale à 5 (Eckel et al. 2013) et χ est un nombre dont la valeur est donnée en fonction d'un nombre d'Ohnesorge Oh .

$$\begin{aligned} \chi &= 1 \quad \text{pour } Oh < 0.1 \\ \chi &= 1 - Oh/7 \quad \text{pour } Oh > 0.1 \end{aligned}$$

avec,

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma d_0}} \quad (3.51)$$

Le temps t^* est calculé à partir de la formule suivante :

$$t^* = \frac{d_0}{|U_l - U_g|} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3.52)$$

La distribution volumique $f_{3,tot}$ de tailles de gouttes générée par l'atomisation primaire est assimilée à la somme de deux distributions, $f_{3,bag}$ et $f_{3,liga}$, indépendantes l'une de l'autre.

$$f_{3,tot}(d) = C_2 f_{3,bag}(d) + (1 - C_2) f_{3,liga}(d) \quad (3.53)$$

Dans l'équation (3.53), C_2 est une constante de calibration du modèle et les distributions $f_{3,i}$ (avec $i = bag$ ou $i = liga$) prennent la forme d'une distribution racine carré normale :

$$f_{3,i}(d) = \frac{A}{\sqrt{d}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{d} - \sqrt{m}}{\sqrt{q}} \right)^2 \right] \quad (3.54)$$

Les coefficients A , m et q sont déterminés à partir des diamètres moyens D_{32} et D_{30} du processus d'atomisation par ligament, d'une part, et, par formation de sac, d'autre part. En pratique, cette méthode constitue une importante limitation à l'intégration d'un tel modèle dans les codes CFD. En effet, si le paramètre m peut être pris égal au D_{30} , les paramètres A et q ne peuvent être exprimés explicitement. Ils doivent donc être ajustés au cas par cas en fonction du D_{32} de la distribution. Les diamètres moyens étant déterminés pour chaque événement d'atomisation, cette méthode est particulièrement couteuse en temps de calcul.

Les coefficients C_1 , C_2 , C_4 et C_5 sont déterminés à partir des distributions de tailles de gouttes expérimentales obtenues sur la configuration de Gepperth et al. (2012) pour chaque point de fonctionnement. Ainsi, même sur la configuration de calibration, le modèle nécessite des ajustements selon le point de fonctionnement pour décrire la distribution de tailles de gouttes issue de l'atomisation primaire. Ceci le rend très difficile à intégrer au sein d'un calcul CFD où les caractéristiques locales de l'écoulement peuvent varier nécessitant un ajustement des constantes en permanence. Il convient également de remarquer que la description de la

distribution de tailles de gouttes selon une somme de deux distributions indépendantes conduit à l'apparition de deux pics de diamètres dans la distribution. Or, les distributions de tailles de gouttes extraites à partir des visualisations expérimentales ainsi que de la simulation de la configuration de Gepperth et al. (2012) dans la partie 2.5.2 ont montré l'existence d'un seul pic. Dans son étude sur une configuration similaire à celle de Gepperth et al. (2012), Chaussonnet et al. (2017) aboutit à la même observation et montre qu'une calibration des constantes du modèle de Eckel et al. (2013) conduit à $C_2 = 0$ ce qui revient à supprimer l'influence des gouttes issues de l'atomisation en sac de la distribution totale. Cette conclusion suggère que la distribution de tailles de gouttes est intégralement pilotée par le processus d'atomisation par formation de ligaments (les gouttes issues de l'atomisation en sac étant trop petites pour influencer significativement la forme de la distribution finale).

Le modèle PAMELA

Développé par Chaussonnet et al. (2013), Chaussonnet (2014), Chaussonnet et al. (2016), le modèle PAMELA (Primary Atomization Model for prEfilming airbLAsT injectors) propose un mécanisme basé sur les trois paramètres de première importance identifiés par Gepperth et al. (2013) pour caractériser la distribution de tailles de gouttes issue du processus d'atomisation primaire. Le premier paramètre d'importance est la vitesse du gaz qui, à travers le flux de quantité de mouvement $\rho_g u_g^2$, contrôle la quantité de mouvement transmise par le gaz au liquide. Le deuxième est le coefficient de tension de surface σ qui influence la dimension de la zone d'accumulation de liquide au niveau du bord du préfilmeur ainsi que la taille des ligaments. Le troisième est la hauteur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} au bord d'atomisation qui est en partie responsable du volume de liquide s'accumulant au niveau de la lèvre. Contrairement aux mécanismes d'atomisation primaire considérés dans les deux précédents modèles, l'écoulement du film liquide est ici découplé de l'atomisation primaire. Cette hypothèse rejoint les observations expérimentales de Gepperth et al. (2013) qui ne constatent pas d'influence de la hauteur du film et des vagues formées à sa surface sur le processus d'atomisation. Le mécanisme d'atomisation alors considéré est présenté en Figure 3.7. Il est issu des travaux de Müller et al. (2004). L'écoulement du film alimente un réservoir de liquide (i) situé au niveau du bord d'atomisation. Une partie de ce réservoir (symbolisée par des hachures dans la Figure 3.7) est immergée dans l'écoulement de gaz à haute vitesse (ii). La surface de celle-ci est fortement cisailée par le gaz ce qui conduit à l'accélération du liquide dans la direction longitudinale de l'écoulement (iii). Cette accélération engendre l'apparition d'une instabilité de Rayleigh-Taylor de longueur d'onde λ_{RT} dans la direction transversale à l'écoulement (iv). L'interface liquide/gaz forme alors une crête qui est soufflée par l'écoulement gazeux (v) et se fragmente en créant une structure en forme de sac et des ligaments (vi).

Partant de ce mécanisme, Chaussonnet et al. (2013), Chaussonnet (2014), Chaussonnet et al. (2016) ont fondé le modèle PAMELA sur les hypothèses que le diamètre de Sauter du spray D_{32} est proportionnel à la longueur d'onde la plus amplifiée λ_{RT} de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, et, que la répartition des tailles de gouttes peut être décrite par une distribution de Rosin-Rammler dont m et q sont respectivement les paramètres de taille et de forme. La densité de probabilité (PDF) numérique de tailles de gouttes $f_0(d)$ est définie par l'équation (3.55) tandis que la PDF numérique cumulative $F_0(d)$ est donnée par la relation (3.56).

$$f_0(d) = qm^{-q}d^{q-1}\exp\left[-\left(\frac{d}{m}\right)^q\right] \quad (3.55)$$

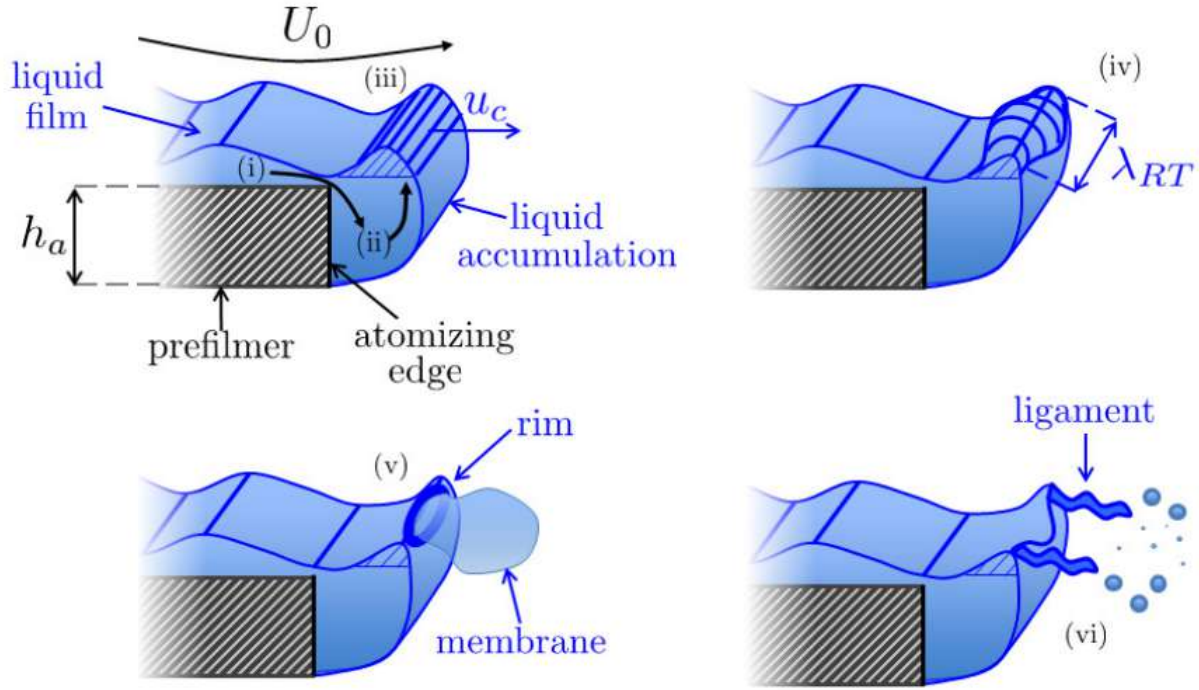


FIGURE 3.7 – Mécanisme d'atomisation primaire proposé par Chaussonnet et al. (2016).

$$F_0(d) = \int_0^d f_0(x)dx = 1 - \exp \left[- \left(\frac{d}{m} \right)^q \right] \quad (3.56)$$

L'expression de la longueur d'onde λ_{RT} est établie à partir d'une relation théorique proposée par Charru (2007) et des travaux de Hong et al. (2002) et Varga et al. (2003) en faisant l'hypothèse que la quantité de liquide qui est accélérée par l'écoulement gazeux de vitesse locale u_g est proportionnelle à la hauteur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} .

$$\lambda_{RT} = \frac{2\pi}{r_p u_g} \sqrt{\frac{6C_1 h_{pref} \sigma}{\rho_g}} \quad (3.57)$$

avec,

$$r_p = \frac{\sqrt{\rho_l}}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_g}} \quad (3.58)$$

où C_1 est une constante du modèle. Le diamètre de Sauter de la distribution s'exprime alors :

$$D_{32} = C_2 \cdot \frac{2\pi}{r_p u_g} \sqrt{\frac{6C_1 h_{pref} \sigma}{\rho_g}} \quad (3.59)$$

Puisque la distribution de tailles de gouttes a par hypothèse la forme d'une Rosin-Rammler, le diamètre de Sauter D_{32} est relié au paramètre m et q par l'équation suivante :

$$D_{32} = m \frac{\Gamma(3/q + 1)}{\Gamma(2/q + 1)} \quad (3.60)$$

où Γ représente la fonction gamma. Combinant les relations (3.59) et (3.60), Chaussonnet et al. (2016) proposent d'exprimer le paramètre m via l'équation :

$$m = C_2 \frac{2\pi}{r_p u_g} \sqrt{\frac{6C_1 h_{pref} \sigma}{\rho_g} \frac{\Gamma(2/q + 1)}{\Gamma(3/q + 1)}} \quad (3.61)$$

Notons que la relation (3.61) peut être réécrite pour faire apparaître un nombre de Weber $We_{h_{pref}}$ basé sur l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur.

$$We_{h_{pref}} = \frac{\rho_g h_{pref} (r_p u_g)^2}{\sigma} \quad (3.62)$$

L'équation (3.61) devient alors :

$$m = C_{12} \frac{h_{pref}}{\sqrt{We_{pref}}} \frac{\Gamma(2/q + 1)}{\Gamma(3/q + 1)} \quad (3.63)$$

où $C_{12} = 2\pi\sqrt{6C_1}C_2$ est une constante du modèle. Ces deux expressions (eq. (3.61) et eq. (3.63)) peuvent être alternativement utilisées. Cependant, la formulation en fonction de $We_{h_{pref}}$ (eq. (3.63)) est utile pour la calibration du modèle.

Le paramètre de forme q de la distribution de Rosin-Rammler est supposé être dépendant de la hauteur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} et des effets aérodynamiques. Ces derniers sont pris en compte via un nombre de Weber aérodynamique We_{δ_g} basé sur l'épaisseur δ_g de la couche limite et défini comme suit :

$$We_{\delta_g} = \frac{\rho_g \delta_g u_g^2}{\sigma} \quad (3.64)$$

Chaussonnet et al. (2016) expriment le paramètre q par l'expression suivante :

$$q = \frac{C_3}{\sqrt{We_{\delta_g}}} + g(h_{pref}) \quad (3.65)$$

avec,

$$g(h_{pref}) = \left(\frac{h_{pref}}{C_4} \right)^2 + C_5 \quad (3.66)$$

C_3 , C_4 et C_5 sont des constantes du modèle. Comme pour les modèles précédents, le phénomène d'atomisation primaire est relié à un temps caractéristique d'occurrence. Ce dernier, appelé τ_{tot} , est défini comme la somme des temps caractéristiques des l'instabilité de Rayleigh-Taylor τ_{RT} et de l'événement de fragmentation τ_{bu} . Or, ces deux temps sont proportionnels à un temps capillaire τ_c , tel que $\tau_{RT} = 10\tau_c$ et $\tau_{bu} = 1.8\tau_c$ (Chaussonnet et al. 2016).

$$\tau_{tot} = 11.8\tau_c \quad (3.67)$$

Le temps capillaire est défini comme suit :

$$\tau_c = \left(\frac{\sigma}{a^3 |\rho_l - \rho_g|} \right)^{1/4} \quad (3.68)$$

où a correspond à l'accélération de la crête de la vague engendrée par l'instabilité de Rayleigh-Taylor et s'exprime :

$$a = \frac{1}{2} \frac{1}{C_1 h_a} \frac{\rho_g}{\rho_l} (r_p u_g)^2 \quad (3.69)$$

Les coefficients C_1 , C_2 , C_3 , C_4 , C_5 et C_{12} sont déterminés à l'aide d'une calibration sur la configuration de Gepperth et al. (2012) pour deux liquides, le ShellsolD70 et un mélange constitué en volume de 50% de Propanediol et 50% d'eau, testés sur un gamme de vitesses moyennes de gaz U_g allant de 20 m.s^{-1} à 70 m.s^{-1} et avec deux préfilmeurs d'épaisseur de lèvre $h_{pref} = 1 \text{ mm}$ et $h_{pref} = 2.5 \text{ mm}$. Notons que la vitesse local u_g de l'écoulement gazeux est définie comme la vitesse du gaz à l'endroit où le liquide est cisailé. Se basant sur des résultats expérimentaux de Morris & Foss (2003), Chaussonnet et al. (2016) proposent d'estimer cette vitesse à partir de la vitesse moyenne de l'écoulement U_g via la relation suivante :

$$u_g = U_{shear} = 0.7U_g \quad (3.70)$$

Les coefficients issus de la calibration sont donnés dans le Tableau 3.8.

C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_{12}
0.670	0.112	6.82	5.99 mm	0.0177	1.40

FIGURE 3.8 – Valeurs des constantes du modèle PAMELA de Chaussonnet et al. (2016).

Testé dans Chaussonnet et al. (2017), sur une configuration proche de celle de Gepperth et al. (2012), ce modèle a permis d'obtenir de très bons résultats tant pour prédire la distribution de tailles de gouttes que pour rendre compte du temps de réponse de l'atomisation primaire à une oscillation de la vitesse du gaz. Il offre également les meilleurs résultats parmi les trois modèles présentés dans cette section. Le modèle a de plus été utilisé par Holz et al. (2016) sur une configuration industrielle d'injecteur annulaire de type Airblast avec préfilmeur. La distribution de tailles de gouttes obtenue est comparable à la distribution expérimentale et les auteurs notent en particulier un bonne prédiction du diamètre de Sauter D_{32} . Ce dernier est représentatif du spray pour l'évaporation et donc la combustion. Cette étude montre également que le modèle PAMELA est capable de prédire adéquatement le spray de gouttes, et en particulier le diamètre de Sauter, généré par un injecteur annulaire de type Airblast avec préfilmeur, sans recalibrer les constantes dérivées à partir de la configuration de Gepperth et al. (2012). Ce dernier point en fait un modèle particulièrement robuste pour son utilisation dans un contexte industriel où la distribution de tailles de gouttes expérimentale n'est pas connue ce qui ne permet pas de calibration.

Les raisons précédemment évoquées font de PAMELA un modèle de choix pour modéliser, au sein d'un calcul CFD, le spray issu d'un injecteur industriel de type Airblast avec préfilmeur avant son évaporation et sa combustion. Toutefois, l'apparition dans les corrélations de la vitesse locale de l'écoulement gazeux u_g ainsi que de l'épaisseur de la couche limite δ_g constitue une limitation majeure à son utilisation. En effet, l'estimation de ces deux grandeurs d'entrée peut être difficile à réaliser dans des configurations complexes. Or, Holz et al. (2016) ont montré en particulier que la vitesse locale du gaz joue un rôle prépondérant dans la distribution de tailles de gouttes obtenue et que son estimation à partir de la formule (3.70) n'est plus valable en présence d'un écoulement tournant. Dans ce type d'écoulement, la couche limite est aussi

très perturbée et sa structure est souvent très éloignée de celle observée dans les configurations académiques. L'estimation a priori de son épaisseur est très complexe et il n'existe pas en général de corrélation fiable pour la calculer facilement. Basé sur les corrélations phénoménologiques de PAMELA, le modèle Automatic-PAMELA, développé au cours de cette thèse et présenté dans la partie suivante, permet de lever ce verrou par une méthodologie de détermination locale de ces deux grandeurs.

3.6.2 Développement du modèle Automatic-PAMELA dans AVBP

Le modèle Automatic-PAMELA développé au cours de cette thèse est détaillé dans cette partie. Reprenant les hypothèses et les corrélations du modèle PAMELA de Chaussonnet et al. (2013), Chaussonnet (2014), Chaussonnet et al. (2016), il s'en démarque par l'expression locale de certaines grandeurs d'entrée dans le but de permettre une utilisation dans des configurations industrielles complexes d'injecteur de type Airblast avec préfilmeur. Comme évoqué dans la section 3.6.1, ces grandeurs sont la vitesse locale du gaz u_g et la hauteur de la couche limite δ_g . Dans le modèle Automatic-PAMELA, elles sont réexprimées pour permettre leurs évaluations locales et automatiques dans des simulations numériques LES sans spécification de l'utilisateur.

Estimation de la vitesse gaz

Dans le modèle PAMELA, G. Chaussonnet fait intervenir la vitesse de cisaillement gazeux à l'interface liquide/gaz. Se basant sur les résultats de Morris & Foss (2003) sur une configuration plane, il montre que cette vitesse correspond à 70% de la vitesse moyenne de l'écoulement gazeux. Cependant, cette solution est spécifique aux configurations planes et ne peut être directement utilisée dans des cas complexes tels que des injecteurs annulaires. Pour pallier cette limitation, il est proposé de baser le calcul de la vitesse de cisaillement gazeux à l'interface liquide/gaz sur la hauteur locale du film liquide arrivant dans la zone d'accumulation ainsi que sur des données proches parois. Le profil de vitesse en paroi est schématisé dans la Figure 3.9 (gauche). Comme la hauteur du film liquide est très faible ($h_f \approx 100 \mu\text{m}$ devant l'épaisseur de gaz au-dessus ($H_g \approx 1 - 10 \text{ mm}$), il est considéré comme mince et son influence sur le profil de vitesse gazeuse est négligée. Le profil de vitesse peut alors être assimilé à un profil classique de couche limite gazeuse comme celui de la Figure 3.9 (droite). Dans ces conditions, la vitesse de cisaillement du gaz à l'interface liquide/gaz est calculée selon la loi logarithmique suivante :

$$u_g = U_{shear} = u_\tau \left[\frac{1}{\kappa} \ln(h_f^+) + B \right] \quad (3.71)$$

où h_f^+ est la hauteur du film liquide adimensionnalisée en unité pariétale,

$$h_f^+ = \frac{h_f U_\tau}{\rho_g}, \quad (3.72)$$

et u_τ est la vitesse de frottement déterminée en l'absence de film liquide en paroi,

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_g}}. \quad (3.73)$$

Dans l'équation (3.73), τ_w représente le cisaillement en paroi estimé directement dans le code AVBP par les lois de paroi (Jaegle et al. 2010).

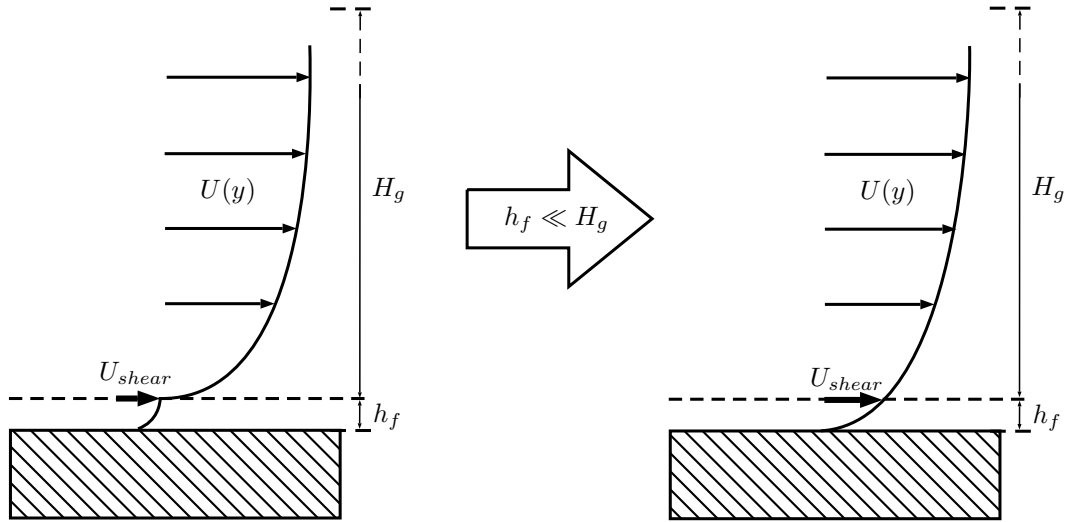


FIGURE 3.9 – Schéma illustrant l'approximation du profil de vitesse dans le film utilisée pour calculer la vitesse de cisaillement U_0 . A gauche : un profil de vitesse typique. A droite : le profil de vitesse considéré dans le modèle Automatic-PAMELA.

Estimation de l'épaisseur de couche limite

L'épaisseur de couche limite est une donnée importante pour caractériser l'atomisation primaire d'un film liquide puisqu'elle peut être interprétée comme l'épaisseur de couche de gaz qui cisaille le film liquide. Son importance en fait l'une des principale variable d'entrée pour les modèles phénoménologiques présentés dans la partie 3.6.1. Cette épaisseur correspond à la distance à la paroi à partir de laquelle le profil de vitesse est établi. Dans le cas d'un canal, elle est souvent définie comme la distance à la paroi pour laquelle la vitesse vaut 99% de la vitesse moyenne de l'écoulement. Dans le modèle PAMELA, G. Chaussonnet propose d'estimer l'épaisseur de couche limite à partir de la corrélation de White (1991) :

$$\delta_g = 0.16 \frac{L_{surf}}{Re_{L_{surf}}^{1/7}} \quad (3.74)$$

où Re est le nombre de Reynolds basé sur la vitesse moyenne de l'écoulement gazeux U_g , la longueur du préfilm L_{surf} et la viscosité cinématique du gaz ν_g .

$$Re = \frac{U_g L_{surf}}{\nu_g} \quad (3.75)$$

Cette formule a été utilisée par Gepperth et al. (2012) pour caractériser la couche limite sur la configuration du KIT. Elle souffre cependant de deux inconvénients majeurs. Tout d'abord, elle a été établie par White (1991) pour des cas de couche limite turbulente se développant le long d'une plaque plane et n'offre aucune assurance quant à sa validité dans d'autres configurations. Il est même peu probable qu'elle fournisse un résultat juste lorsque la couche limite ne peut pas pleinement se développer. C'est, par exemple, le cas dans les injecteurs aéronautiques où la zone d'atomisation est en général fortement cisailée par un écoulement rotatif. Ensuite, la vitesse moyenne de l'écoulement est un paramètre global qui peut être très difficile à estimer dans des écoulements complexes comme les injecteurs annulaires où une zone de recirculation

est souvent présente au centre de l'écoulement. Bien que l'utilisation de corrélations soit très pratique, ce type d'approche limite l'utilisation du modèle PAMELA à des cas simples où le calcul de l'épaisseur de la couche limite est aisé. Afin de lever cet important verrou d'utilisation, il est proposé dans le modèle Automatic-PAMELA de déterminer localement cette grandeur à l'aide d'un algorithme d'estimation. Cet algorithme est exécuté pour chaque itération du calcul dans chaque cellule du maillage en paroi située au niveau du bord d'atomisation et où le liquide s'accumule avant d'être atomisé. Ces cellules sont appelées cellules d'accumulation.

L'estimation locale de l'épaisseur de couche limite dans une cellule d'accumulation passe nécessairement par la connaissance du profil de vitesse situé au-dessus d'elle dans la direction normale à la paroi. Cependant dans le contexte d'un calcul exécuté parallèlement sur plusieurs processeurs et sur un maillage non-structuré, les cellules d'accumulation ne connaissent que leurs voisins directs. L'échange d'information entre la cellule d'accumulation et les cellules situées au-dessus d'elle est alors compliqué à mettre en oeuvre et l'utilisation de méthodes standards du type "gather-scatter" qui s'appliquent sur tout le maillage peuvent rapidement devenir très coûteuses en temps de calcul. Dans l'optique d'obtenir le profil de vitesse pour un moindre coût de calcul, une technique basée sur une méthode de transport discrète et locale a été imaginée. L'idée est que chaque cellule d'accumulation envoie une sonde dans l'écoulement au-dessus d'elle. Cette sonde enregistre le profil de vitesse puis ramène l'information dans la cellule d'accumulation d'où elle a été envoyée. La Figure (3.10) illustre les principales étapes de cet algorithme de recherche de profil exécuté pour chaque cellule d'accumulation. Ces étapes sont les suivantes :

1. *Initialisation d'une sonde dans la cellule d'accumulation.*
2. *Transport de la sonde dans la direction normale à la paroi jusqu'à la cellule voisine.* Cette étape de transport est réalisée par l'algorithme proposé par Haselbacher et al. (2007), et implémenté dans le solveur AVBP par García (2009). La cellule dans laquelle déplacer la sonde y est déterminée en réalisant des produits scalaires entre le vecteur direction de la particule (ici \vec{n}) et les vecteurs normaux aux faces de la cellule courante. Le produit scalaire maximum donne la face de la cellule courante que doit traverser la sonde pour aller dans la direction \vec{n} . La sonde est alors déplacée selon son vecteur direction jusqu'à cette face, puis la nouvelle cellule à laquelle elle appartient est déterminée via un tableau de connectivité entre les faces des cellules.
3. *Enregistrement de la distance à la paroi et de la vitesse correspondante par la sonde.* La distance à la paroi est déterminée en incrémentant la distance parcourue par la sonde lors de chaque étape de transport. Le vecteur vitesse est d'abord interpolé à la position de la sonde, puis sa norme est enregistrée. Pour une cellule contenant N_v sommets, le poids d'interpolation w_k relatif au sommet k est inversement proportionnel à la distance l_k entre la position de la sonde et le sommet k .

$$w_k = \frac{1/l_k}{\sum_{k=1}^{N_v} l_k} \quad (3.76)$$

Chaque composante $u_{i,interp}$ du vecteur vitesse \vec{u} est ensuite calculée par la formulation suivante :

$$u_{i,interp} = \sum_{k=1}^{N_v} w_k u_{i,k} \quad (3.77)$$

4. *Exécution des étapes 2 et 3 jusqu'à ce que la distance maximum choisie par l'utilisateur ait été parcourue.* Cette distance doit être suffisamment grande pour couvrir le profil de

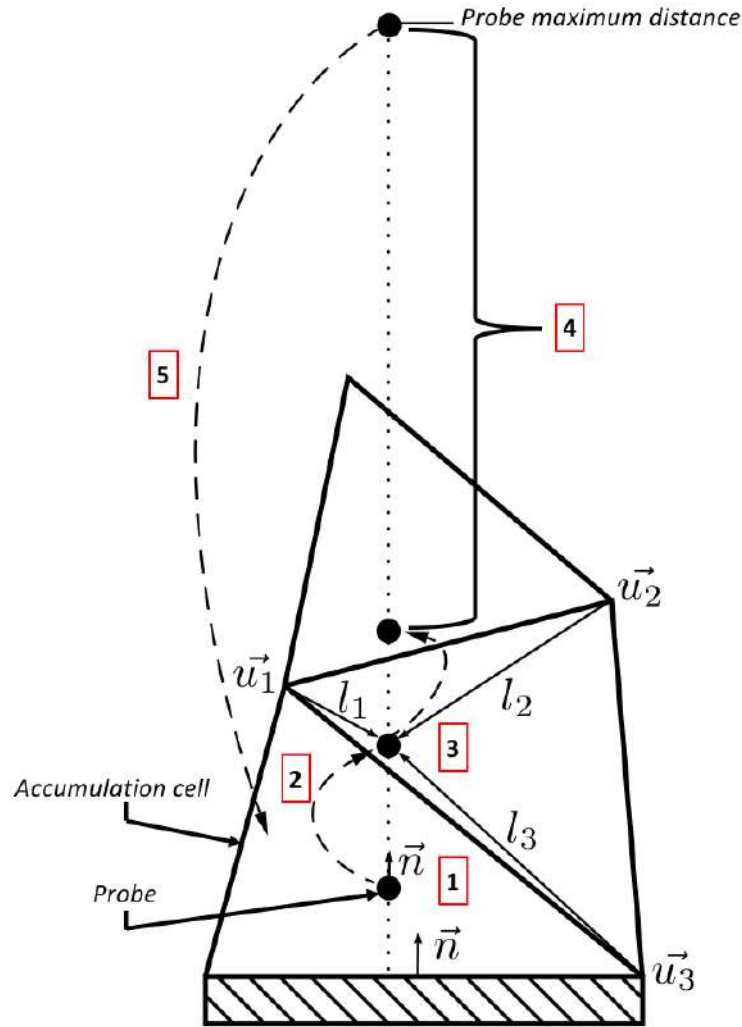


FIGURE 3.10 – Schéma représentant les principales étapes de l’algorithme de recherche du profil de couche limite appliqué à une cellule d’accumulation. Le schéma est réalisé en 2D sur un maillage triangle pour la clarté de l’explication.

couche limite tout en évitant un transport inutile de la sonde loin de la zone d’établissement du profil. Notons que cette distance n’a pas d’impact sur l’épaisseur de couche limite détectée dès l’instant où tout le profil est couvert.

5. *Retour de l’information enregistrée par la sonde dans la cellule d’accumulation.* Pour ce faire, le vecteur direction \vec{n} de la sonde est inversé et elle est transportée dans le sens inverse sans enregistrer de valeur jusqu’à la cellule d’accumulation. En pratique, l’information contenue dans la sonde peut être récupérée par la cellule d’accumulation dès lors qu’elle est localisée dans le même processeur. Pour optimiser le coût de calcul lié à l’algorithme, la sonde est donc transportée jusqu’au processeur contenant la cellule d’accumulation puis, l’information est directement récupérée par cette dernière avant que la sonde ne soit détruite avant de terminer son parcours.

L’information extraite par l’algorithme de recherche de profil et récupérée par la cellule d’accumulation se présente sous la forme d’un ensemble de couples de valeurs de distances à la paroi et de normes de la vitesse. La Figure 3.11 illustre un exemple de profil obtenu pour une

cellule d'accumulation issue d'un calcul de la configuration de Gepperth et al. (2012).

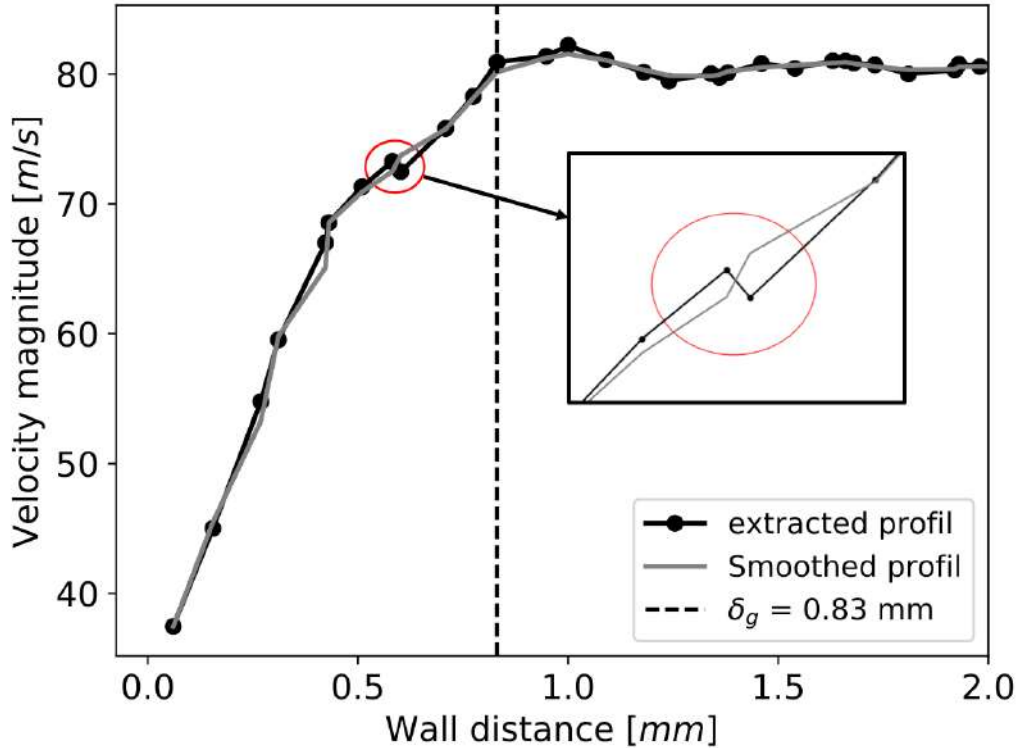


FIGURE 3.11 – Profil de vitesse extrait par l'algorithme de recherche de profil appliqué par une cellule d'accumulation sur un calcul de la configuration de Gepperth et al. (2012) avec le maillage fin (présenté dans la section 3.6.3). La courbe noire représente le profil de vitesse extrait par l'algorithme où les symboles sont les points enregistrés par la sonde. La courbe grise est un profil lissé en appliquant trois fois l'équation (3.78) à tous ses points. Le cercle rouge met en évidence une inversion du gradient non-physique sur le profil d'extrait. Le trait vertical en pointillé matérialise l'épaisseur de couche limite estimée.

La Figure 3.11 montre que l'algorithme mis en place permet bien à une cellule de paroi de connaître le profil de vitesse qui se développe au-dessus d'elle. Ce profil est déterminé à chaque itération du calcul puis stocké au sein de la cellule d'accumulation et moyenné point à point au cours du temps. Lorsque la connaissance de l'épaisseur de la couche limite δ_g est nécessaire, typiquement à chaque événement d'atomisation primaire, le profil est, tout d'abord, lissé en appliquant trois fois l'équation (3.78) à tous les points du profil.

$$u_i = \frac{u_{i-1} + 4u_i + u_{i+1}}{6} \quad (3.78)$$

où u_i est la vitesse dans le profil à la position i . Cette méthode empirique permet d'enlever les oscillations point à point qui peuvent en particulier engendrer des inversions de gradient comme au niveau de la zone délimitée par le cercle rouge dans la Figure 3.11. L'épaisseur de la couche limite est ensuite déterminée à partir du profil lissé (ligne gris dans l'exemple de la Figure 3.11) comme la distance à la paroi où la vitesse de l'écoulement vaut 99% de la vitesse de l'écoulement établi U_{moy} . Cette vitesse est estimée à partir du profil comme le minimum de

la vitesse obtenue selon trois critères :

$$U_{moy} = \min(U_1, U_2, U_3) \quad (3.79)$$

- U_1 est la vitesse obtenue à la première inversion du gradient dans le profil.
- U_2 est la vitesse maximum dans le profil.
- U_3 est la vitesse obtenue si celle-ci varie de moins de 1% sur quatre points consécutifs du profil.

Bien que le choix de cette définition soit empirique, la Figure 3.11 montre que cette méthode de détermination offre une bonne estimation de l'épaisseur de couche limite. Les critères ont été mis au point à partir de l'étude des profils de vitesse obtenus sur la configuration de Gepperth et al. (2012) où trois maillages (définis dans la section 3.6.3) ont été testés, d'une part, et, sur deux configurations d'injecteur industriels de type Airblast (dont une est présentée en section 3.7), d'autre part. La diversité des profils de vitesse testés, avec notamment des écoulements fortement tournant dans les injecteurs, permet d'assurer une bonne confiance sur la capacité de la méthode à estimer de façon satisfaisante l'épaisseur de la couche limite dans un grand nombre de configurations d'injecteurs industriels.

Implémentation algorithmique du modèle Automatic-PAMELA

Dans le processus décrit par Müller et al. (2004), le nombre d'événements d'atomisation primaire est directement dépendant du débit de liquide qui alimente la lèvres d'atomisation. Gepperth et al. (2012) observent, en effet, une augmentation du nombre d'événements lorsque le débit de liquide augmente. Pour rendre compte de ce phénomène, il est proposé, comme dans Chaussonnet et al. (2016), d'orienter l'algorithme du point de vue de la masse, i.e. des gouttes, pénétrant au niveau de la lèvres d'atomisation. Il est considéré que lorsqu'une quantité de masse, i.e. une goutte, arrive à la lèvres, elle est atomisée au bout d'une période proportionnelle au temps caractéristique capillaire τ_c (eq. (3.68)).

Les principales étapes algorithmiques amenant à l'atomisation primaire d'une goutte par le modèle Automatic-PAMELA sont résumées dans la Figure 3.12. Elles sont détaillées ci-dessous :

1. Lorsqu'une goutte se déplace dans le film, elle enregistre le frottement en paroi τ_w et l'épaisseur du film h_f . Ces grandeurs sont respectivement calculées par la loi de paroi et par le modèle de film puis, sont localement récupérées par la goutte où elles sont stockées. Le but final de cette procédure est d'utiliser ces valeurs pour estimer une vitesse locale de gaz au-dessus de la lèvres d'atomisation via l'équation (3.71). Afin que l'estimation reflète au mieux les conditions à cet endroit, elles sont moyennées via une procédure de moyenne glissante sur les 2000 dernières valeurs enregistrées durant le déplacement de la goutte. Notons que la vitesse des gouttes dans un film liquide étant lente (de l'ordre de 1 m.s^{-1} dans les cas les plus rapides considérées ici et pour un pas de temps de l'ordre de $dt \approx 2.5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$), la distance de déplacement de la goutte correspondante à 2000 itérations est très faible (environ 0.5 mm dans les cas les plus rapides). Ce nombre d'itérations a été choisi arbitrairement mais offre un bon compromis entre une distance de déplacement très faible, qui permet d'obtenir une estimation au plus près de la lèvres d'atomisation, et un lissage des valeurs obtenues pour éviter les fortes oscillations point à point dont souffrent localement ces grandeurs. Il convient de remarquer que l'utilisation des valeurs locales de τ_w et h_f dans la cellule d'accumulation serait plus facile à mettre en place. Cependant, la présence du bord d'atomisation détériore beaucoup la qualité

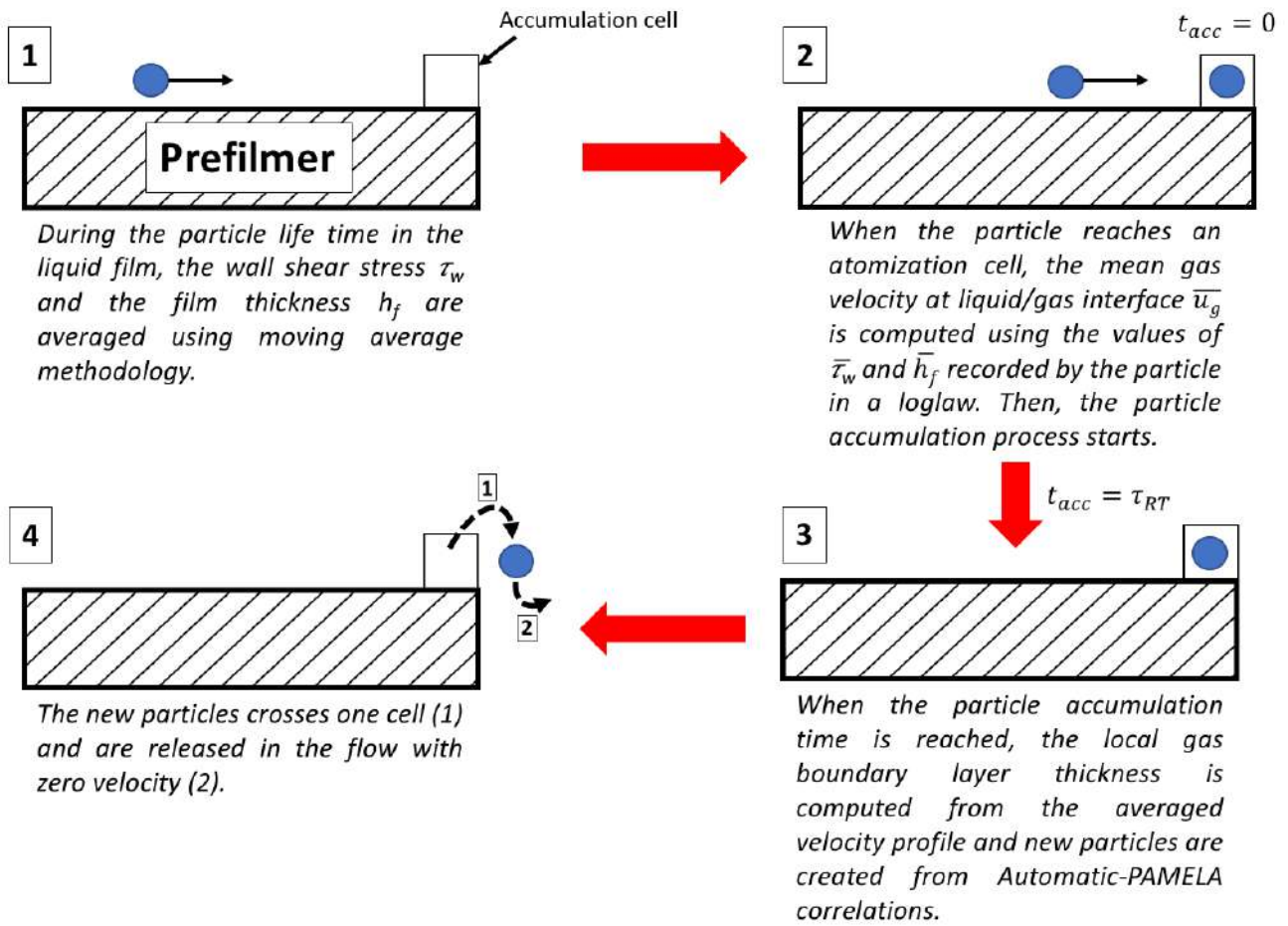


FIGURE 3.12 – Schéma des principales étapes algorithmiques amenant à l’atomisation primaire d’une goutte par le modèle Automatic-PAMELA.

- des valeurs prédites par le solveur dans cette cellule à cause de difficultés liées aux calculs des normales dans cette zone. Leur utilisation est donc à éviter.
2. Lorsque la particule atteint le bord d’atomisation, la vitesse locale de gaz u_g au-dessus de la lèvre est calculée à partir de la relation (3.71) à l’aide des valeurs moyennées de frottement en paroi $\bar{\tau}_w$ et de l’épaisseur du film \bar{h}_f . La particule commence ensuite son accumulation durant le temps caractéristique τ_{tot} (eq. (3.67)). Durant cette étape, la goutte est stationnaire et n’interagit pas avec l’écoulement gazeux environnant. Notons que la cellule courante est appelée "cellule d’accumulation". Ces cellules sont détectées lors de l’arrivée de la première goutte au niveau du bord d’atomisation. Elles servent à stocker le profil moyen de vitesse détecté par l’algorithme de recherche de profil présenté dans la section 3.6.2 ou encore des valeurs résiduelles de l’atomisation telles que la masse de liquide qui n’a pas pu être injectée lors des événements d’atomisation précédents comme expliqué dans la suite.
 3. Lorsque le temps d’accumulation de la particule atteint le temps caractéristique de l’atomisation $\tau_{tot} = 11.8\tau_c$ (eq. (3.67)), la masse m_p associée à la particule est transférée à un réservoir de masse stocké à la cellule et initialement constitué de la masse de liquide m_{cell} qui n’a pas pu être injectée lors des événements d’atomisation précédents. Le processus

d'atomisation est ensuite déclenché. La procédure utilisée a été développée pour assurer de conserver la masse de liquide tout en fournissant une distribution de tailles de gouttes cohérente. Ses principales étapes sont résumées dans la Figure 3.13 et sont les suivantes :

- (a) L'épaisseur de la couche limite δ_g est déterminée à partir du profil moyen de vitesse en utilisant l'algorithme présenté dans la section 3.6.2.
- (b) Les coefficients m et q de la distribution de Rosin-Rammler sont calculés à l'aide des corrélations présentées dans la section 3.6.1 avec en entrée la vitesse moyenne local $u_g = U_{shear}$, l'épaisseur moyenne de couche limite locale δ_g , l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} (spécifiée par l'utilisateur) et les propriétés physiques des fluides.
- (c) Un diamètre aléatoire est tiré dans la distribution de Rosin-Rammler. Pour ce faire, la distribution numérique cumulative $F_0(d)$ est utilisée car, contrairement à la densité de probabilité $f_0(d)$, elle est strictement monotone et ses valeurs sont comprises dans l'intervalle $[0, 1]$. Pour obtenir un diamètre aléatoire d_{new} appartenant à la distribution, il suffit donc de tirer un nombre aléatoire $X = F_0(d_{new})$ compris entre 0 et 1 puis d'inverser l'équation (3.56) :

$$d_{new} = -m \ln [(1 - X)^{1/q}] \quad (3.80)$$

- (d) Si la masse m_{new} de la goutte de diamètre d_{new} est inférieure à la masse contenue dans le réservoir de masse m_{cell} , celle-ci est retranchée au réservoir et la goutte de diamètre d_{new} est injectée avec les mêmes propriétés physiques que la goutte initiale. Si la masse contenue dans le réservoir est trop faible pour injecter la goutte de diamètre d_{new} , la procédure d'injection est stoppée et le diamètre d_{new} est stocké pour être injecté en priorité au prochain événement d'atomisation. La masse restante est conservée dans le réservoir de masse et la particule initiale est supprimée.
 - (e) Les étapes (c) et (d) sont exécutées tant que la masse disponible dans le réservoir est suffisante pour injecter le diamètre d_{new} .
4. Lorsque le processus d'atomisation est terminé, (1) les nouvelles gouttes sont décalées dans la direction de l'écoulement d'une distance correspondante à une cellule. Puis, (2) elles sont relâchées dans l'écoulement. Comme dans le modèle PAMELA, leurs vitesses sont mises à zéro dans le but d'approximer la très faible vitesse des gouttes juste après leur création observée expérimentalement (Gepperth et al. 2012).

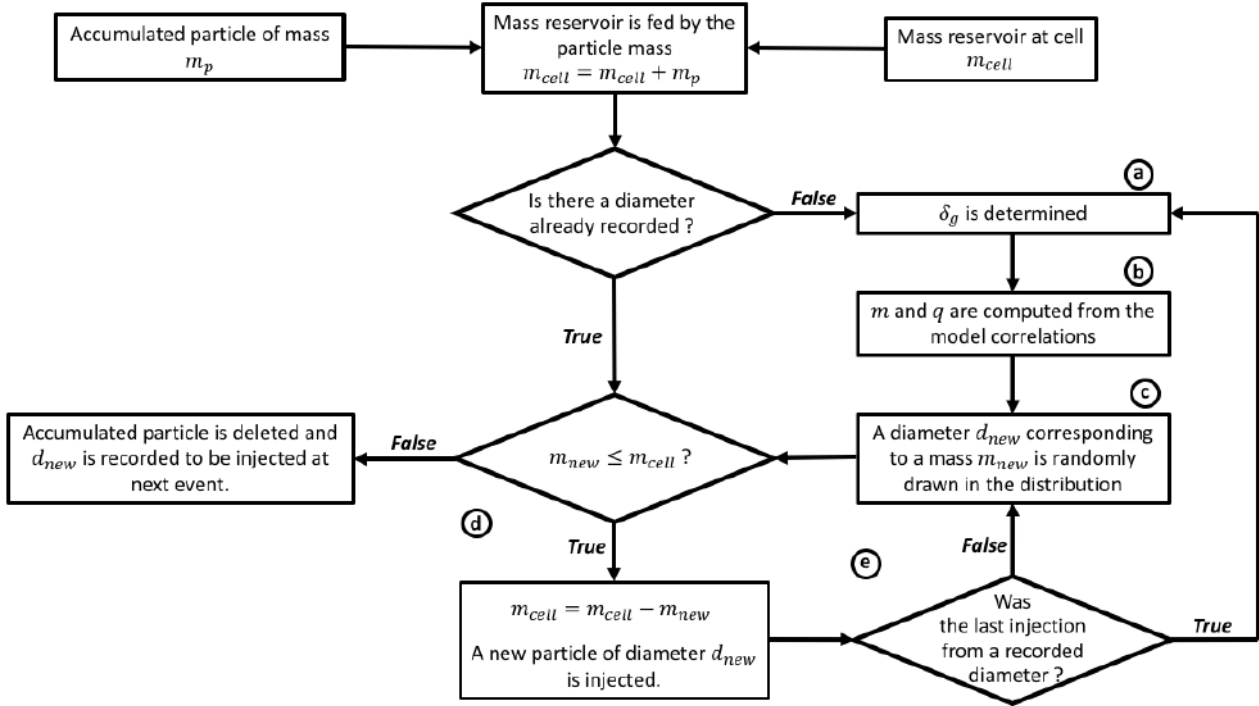


FIGURE 3.13 – Schéma d'exécution de l'algorithme de création de gouttes issues d'un événement d'atomisation primaire par le modèle Automatic-PAMELA.

3.6.3 Calculs de calibration du modèle Automatic-PAMELA sur la configuration de Gepperth et al. (2012)

Le changement des paramètres d'entrée du modèle Automatic-PAMELA par rapport au modèle PAMELA nécessite une recalibration des constantes. Comme pour ce dernier modèle, la calibration est réalisée à partir de la configuration de Gepperth et al. (2012) présentée dans la partie 2.3. La première partie redonne brièvement des informations sur la configuration et explicite les points de fonctionnement étudiés tandis que le maillage et la recalibration sont détaillés ensuite.

Configuration d'étude et points de fonctionnement étudiés

La configuration expérimentale, présentée dans le chapitre précédent (partie 2.3), a été conçue et réalisée au Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) de l'université technologique de Karlsruhe (KIT) pour étudier les phénomènes d'écoulement de film et d'atomisation primaire dans des conditions de fonctionnement proches de celle des injecteurs aéronautiques de type Airblast avec préfilmeur. Pour cette raison, elle est particulièrement intéressante pour développer ou calibrer des modèles phénoménologiques d'atomisation avant de les appliquer sur des configurations réelles. La matrice de calibration est inspirée de celle utilisée dans la thèse de Chaussonnet (2014) pour la calibration du modèle PAMELA. Trois paramètres sont ainsi étudiés : la vitesse du gaz, les propriétés du liquide et l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur. Les vitesses de gaz sont exprimées arbitrairement en vitesses moyennes calculées à partir du débit dans le canal. Le Tableau 3.14 donne la correspondance entre la vitesse moyenne et le débit de gaz. Le gaz est de l'air à pression atmosphérique $P = 1.013$ bar et température ambiante

$T = 298$ K.

Vitesse moyenne [m.s ⁻¹]	40	60	70
Débit massique en entrée [g.s ⁻¹]	73.75	110.63	129.06
Vitesse moyenne en entrée [m.s ⁻¹]	12.85	19.28	22.49

FIGURE 3.14 – Paramètres de l'écoulement gazeux en entrée du domaine de calcul de la configuration de Gepperth et al. (2012).

Deux types de liquide sont également testés pour prendre en compte l'influence des propriétés du fluide, et en particulier de la tension de surface, dans la recalibration du modèle : le Shellsol D70 (D70) et un mélange isovolume de 1,2-Propanediol et d'eau (Prop). Leurs caractéristiques sont résumées dans le Tableau 2.2. Il sont injectés sous la forme d'un film liquide avec un débit volumique 2D (équation (2.3)) de $\Lambda_l = 50$ mm²/s.

L'épaisseur de la lèvre du préfilmeur de la géométrie utilisée pour les calculs est de 2.5 mm. Cette grandeur n'ayant pas d'influence sur l'écoulement en amont de la lèvre, elle n'impacte pas les valeurs des autres grandeurs en entrée du modèle (vitesse de cisaillement et épaisseur de couche limite). Son influence sur la distribution de tailles de goutte est donc simplement testée en fixant sa valeur dans les corrélations. Deux épaisseurs sont ainsi étudiées : $h_{pref} = 1$ mm et $h_{pref} = 2.5$ mm.

Le Tableau 3.15 résume la matrice des cas utilisés pour la calibration du modèle Automatic-PAMELA. Pour simplifier l'écriture, le nom de chaque point de fonctionnement est construit à partir de sa vitesse moyenne de gaz suivi du liquide considéré. Par exemple, un calcul avec une vitesse moyenne gaz de 40 m/s et du Shellsol D70 s'intitule : U40D70.

Type de liquide	Vitesse moyenne de gaz [m.s ⁻¹]		
	40	60	70
Shellsol D70	U40D70	U60D70	U70D70
1 :1 vol. mix. : H ₂ O-1,2-Propanediol	U40Prop	U60Prop	U70Prop

FIGURE 3.15 – Matrice des cas considérés pour la calibration du modèle Automatic-PAMELA sur la configuration de Gepperth et al. (2012).

Domaine de calcul

Le domaine considéré pour les calculs représente une partie de la zone d'essai centrée sur le préfilmeur. Il est constitué d'un convergent en entrée, d'un canal rectangulaire contenant le préfilmeur et d'un large plenum représentant l'atmosphère. La Figure 3.16 (gauche) montre le convergent et le canal tandis que la Figure 3.16 (droite) rend compte de la configuration complète. Les dimensions de la zone d'essai sont conformes au schéma expérimental présenté en Figure 2.1 (gauche). Les calculs sont réalisés avec un préfilmeur d'épaisseur $h_{pref} = 2.5$ mm au niveau du bord d'atomisation. Les dimensions du plenum sont très grandes devant celles du canal contenant le préfilmeur afin de ne pas contraindre l'écoulement en sortie du canal d'essai tout en évitant l'apparition de recirculations au niveau de la sortie du domaine. Un écoulement

co-courant est également ajouté pour faciliter l'évacuation de l'air vers la sortie. Sa vitesse correspond à 10% de la vitesse de l'écoulement au niveau de l'entrée d'air.

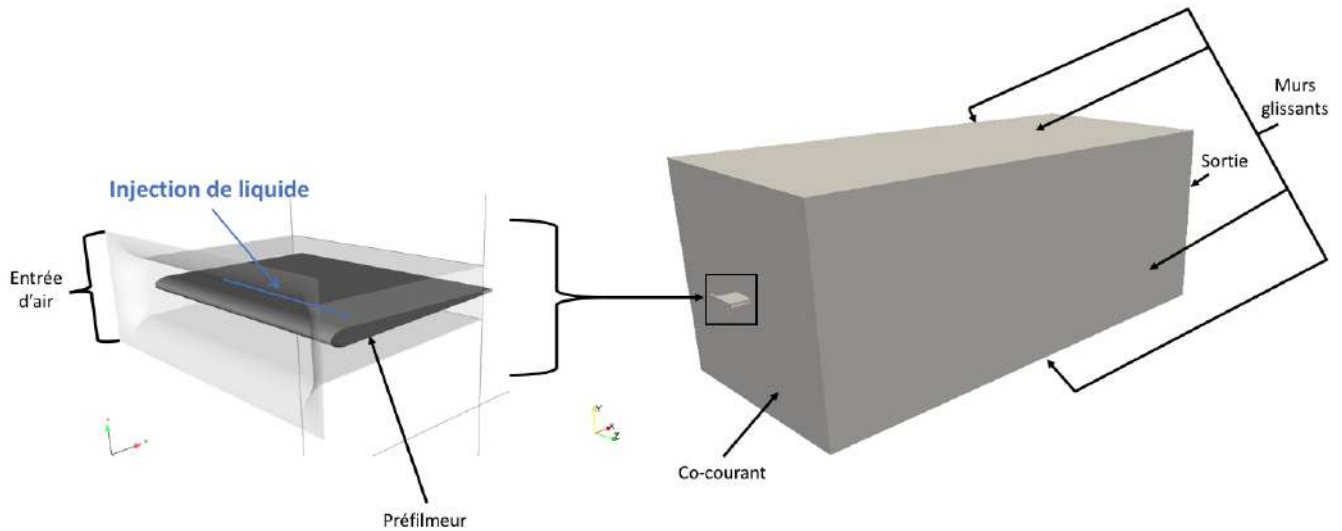


FIGURE 3.16 – Visualisation du domaine de simulation et des conditions aux limites utilisés pour les calculs de la configuration Geppert et al. (2012). A gauche : Un zoom sur le convergent et le canal contenant le préfilmeur. A droite : La configuration complète.

Les parois du plenum sont des murs glissants tandis que celles du convergent en entrée, du canal rectangulaire et du préfilmeur sont des murs adiabatiques utilisant une loi de paroi de type "Loglaw". Les entrées et la sortie du domaine sont imposées via la méthode des caractéristiques NSCBC (Poinot & Lele 1992). L'une des vitesses moyennes listées dans le Tableau 3.14 est directement imposée en entrée du domaine afin de garantir un débit correspondant à une vitesse moyenne expérimentale dans le canal de 40, 60 ou 70 m.s^{-1} . La température de l'air en entrée est de 298 K. Une pression ambiante de 1.013 bar est imposée dans le domaine via la condition de sortie.

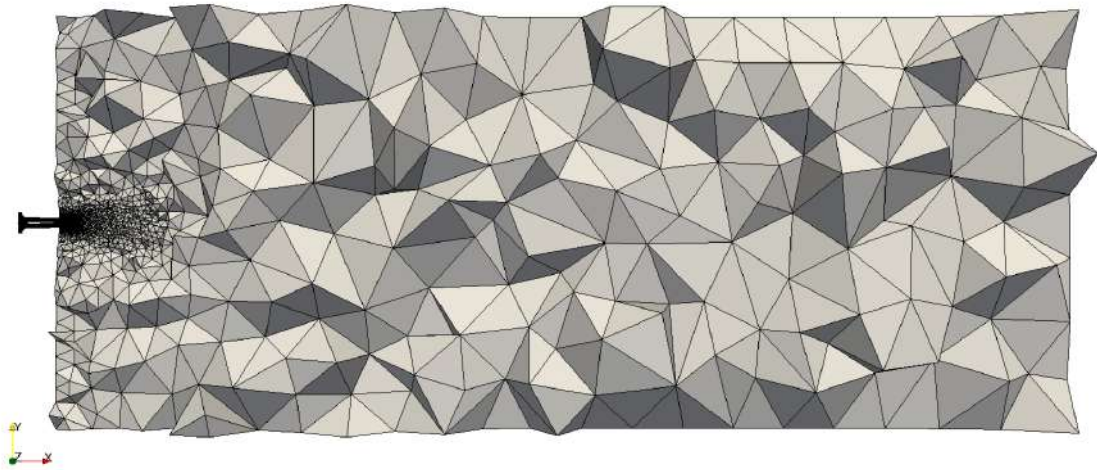
Contrairement aux expériences, la phase liquide est directement injectée dans le canal sous la forme de gouttes Lagrangiennes. La zone d'injection est une ligne de 50 mm de long située 0.2 mm au-dessus de la paroi du préfilmeur et à la même distance du bord d'atomisation que l'expérience, soit 47 mm (Figure 3.16 - gauche). Les gouttes sont injectées avec une vitesse de 1 m.s^{-1} dans la direction du préfilmeur de sorte qu'elles impactent sa paroi peu de temps après leur injection et forment un film liquide. Le diamètre des particules dans le film n'ayant pas d'impact sur son l'écoulement, il est arbitrairement fixé à 200 μm . Avec le débit liquide considéré, cette taille permet d'injecter un nombre suffisant de particules pour assurer un remplissage homogène des cellules dans la zone de film tout en y conservant un nombre raisonnable de particules. La retro-action de la traînée des particules sur l'écoulement gazeux est activée dans le calcul. Il convient cependant de noter que l'influence des particules dans le film liquide sur le gaz proche de la paroi n'est pas pris en compte du fait de l'hypothèse d'un film liquide mince. Considérant la vitesse élevée de l'écoulement, l'influence de la gravité est négligée dans les calculs.

Maillages

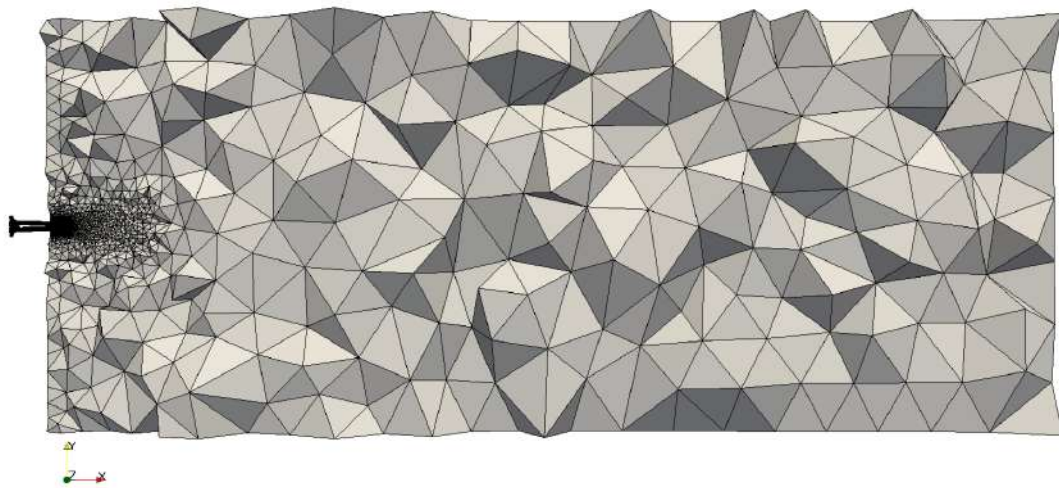
Trois maillages sont utilisés pour étudier l'influence de la résolution sur les grandeurs d'intérêt pour le modèle Automatic-PAMELA : hauteur de film liquide, cisaillement en paroi le long du film et épaisseur de la couche limite au niveau du bord d'atomisation. La Figure 3.18 en présente des coupes dans le plan (x, y) en $Z = 0$. Comme le montre la Figure 3.19, l'effort de résolution se concentre principalement sur le film et le bord d'atomisation. Ceci se fait au détriment en particulier de la zone de recirculation derrière la lèvre du préfilmeur. Une étude poussée de l'écoulement dans cette zone a précédemment été réalisée dans la thèse de Chaussonnet (2014). Elle n'est pas reconduite dans cette thèse car l'écoulement en aval n'a pas d'influence sur la distribution de tailles de gouttes donnée par le modèle Automatic-PAMELA. Pour cette étude de calibration, le critère de résolution est donc légèrement relâché dans la zone en aval proche du préfilmeur puis, le maillage est fortement déaffiné dans le plenum de sortie. Le maillage grossier (Figures 3.18a et 3.19a) contient 1.3 millions d'éléments et permet de tester l'impact d'une résolution faible sur les modèles de film et d'atomisation primaire. La taille caractéristique des cellules est de $\Delta x = 1$ mm dans la zone de film et au niveau du bord d'atomisation. Un maillage moyen (Figures 3.18b et 3.19b) contenant 5.0 millions d'éléments est également réalisé. Avec $\Delta x = 0.5$ mm dans la zone de film et au bord d'atomisation, il atteint des tailles de maille représentatives de celles utilisées pour un calcul d'injecteur complet et constitue ainsi le maillage de référence de cette étude. Pour finir, un troisième maillage (Figures 3.18c et 3.19c) est utilisé dans le but de vérifier l'état de convergence des quantités d'intérêt sur le maillage moyen. La taille caractéristique de ses cellules est de $\Delta x = 0.25$ mm dans les régions du film et du bord d'atomisation. Le Tableau 3.17 résume les principales propriétés de ces trois maillages.

Paramètre	Grossier	Moyen	Fin
Nombre de cellules	1 322 394	5 035 187	7 396 762
Nombre de noeuds	245 879	913 479	1 344 874
Taille du maillage dans la région du film [mm]	1	0.5	0.25
Taille du maillage au bord d'atomisation [mm]	1	0.5	0.25

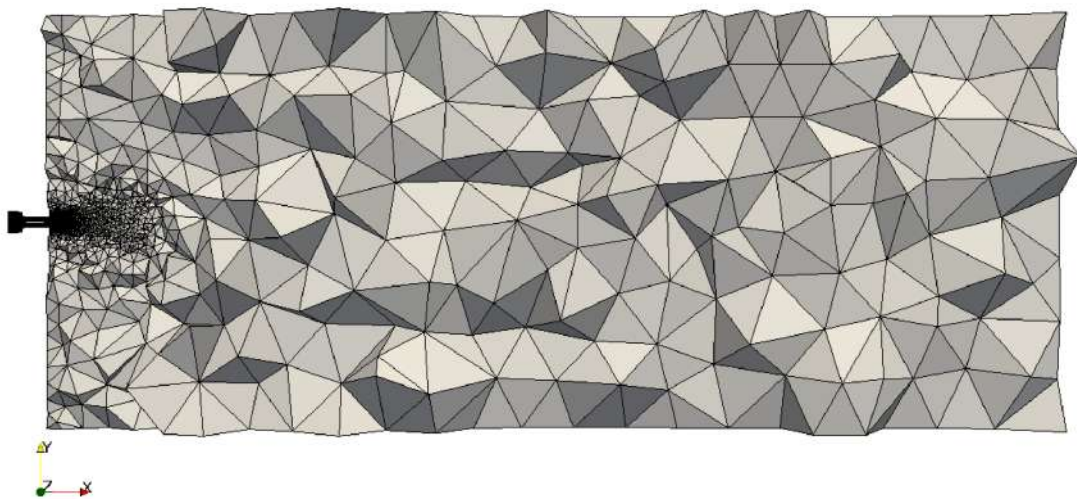
FIGURE 3.17 – Paramètres des maillages de la configuration de Gepperth et al. (2012) utilisés pour la calibration du modèle Automatic-PAMELA.



(a) Maillage grossier

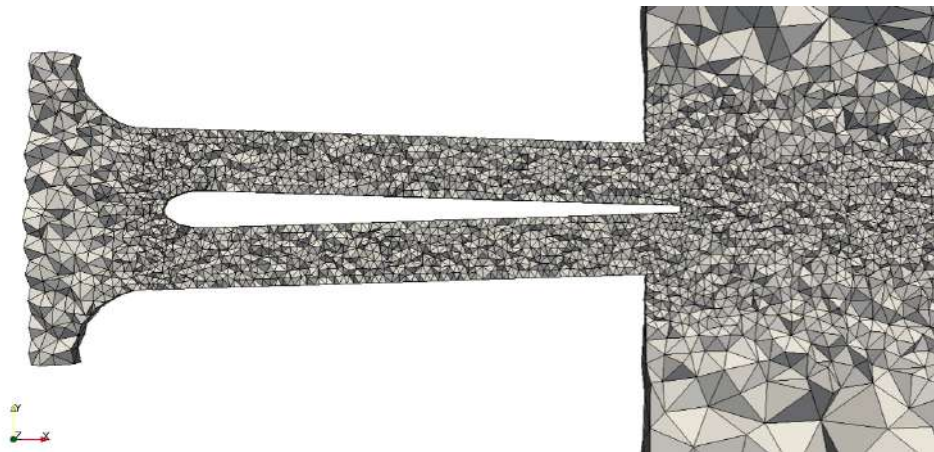


(b) Maillage moyen

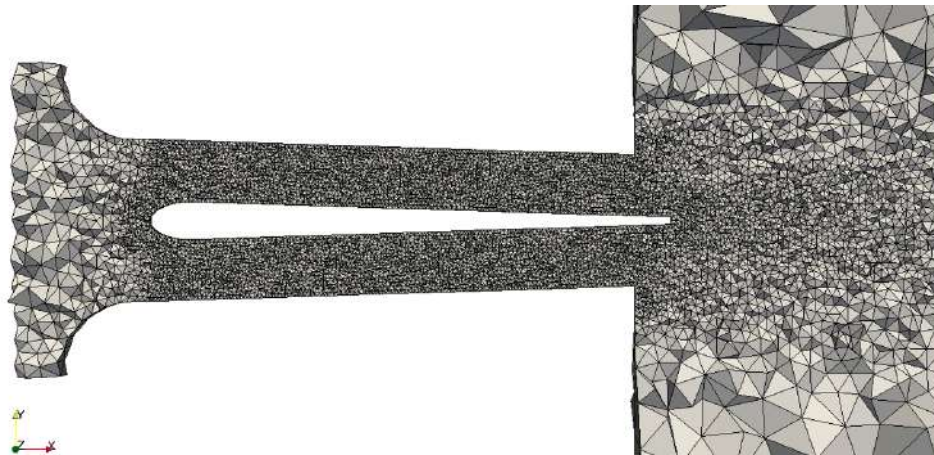


(c) Maillage fin

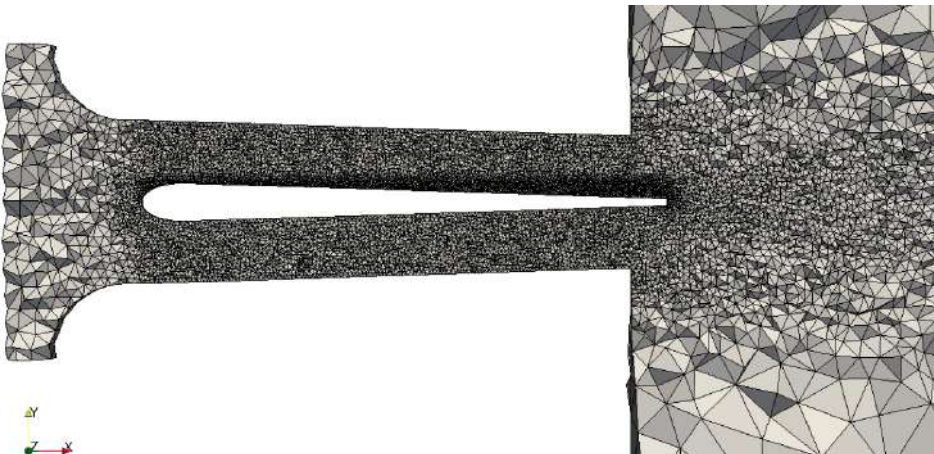
FIGURE 3.18 – Coupe en $Z = 0$ des différents maillages utilisés pour les calculs de la configuration de Gepperth et al. (2012).



(a) Maillage grossier



(b) Maillage moyen



(c) Maillage fin

FIGURE 3.19 – Zoom sur le convergent et le canal contenant le préfilmeur dans une coupe en $Z = 0$ des différents maillages utilisés pour les calculs de la configuration de Gepperth et al. (2012).

Paramètres numériques

Les paramètres numériques choisis pour les simulations sont résumés dans le Tableau 3.20. Les flux convectifs sont résolus grâce au schéma à deux étapes TTGC (Colin & Rudgyard 2000) d'ordre trois en espace et en temps. En pratique, un schéma de Lax-Wendroff (Lax & Wendroff 1960), d'ordre deux en espace et en temps, est utilisé pour accélérer l'établissement du calcul puis, un basculement vers le schéma de TTGC (Colin & Rudgyard 2000) est opéré lorsque les conditions sont stables. Les flux diffusifs sont calculés à l'aide d'un opérateur 2Δ (Lamarque 2007). Un opérateur de viscosité artificielle basé sur le senseur de Colin (Colin 2000) est également appliqué pour assurer la stabilité du calcul. Pour finir, la turbulence en sous-maille est modélisée par le modèle de Smagorinsky dynamique (Germano et al. 1991).

Schéma de convection	TTGC
Opérateur de diffusion	2Δ
Modèle de sous-maillage	Smagorinsky dynamique
modèle de viscosité artificielle	Senseur de Colin
Coefficient d'ordre 2	0.05
Coefficient d'ordre 4	0.005

FIGURE 3.20 – Paramètres numériques utilisés pour les simulations de la configuration de Gepperth et al. (2012).

Déroulement des calculs

Les calculs de recalibration sont réalisés en deux étapes. Tout d'abord, l'écoulement gazeux est établi et convergé sans la présence de la phase liquide. Ensuite, le processus d'injection est entamé. Les particules Lagrangiennes viennent alors créer un film liquide le long du préfilmeur et s'écoulent jusqu'au bord d'atomisation. Lorsqu'elles arrivent dans cette zone, les grandeurs caractéristiques du modèle (hauteur de film, cisaillement gazeux en paroi et épaisseur de couche limite) sont relevées et sont utilisées pour calibrer le modèle Automatic-PAMELA.

Convergence de l'écoulement gazeux

L'établissement du calcul est contrôlé en se basant sur le temps de passage de l'écoulement gazeux dans la zone d'intérêt située entre l'entrée du domaine et le bord d'atomisation du préfilmeur et longue de 88 mm. Ce temps de passage est déterminé en se basant sur la vitesse moyenne de l'écoulement gazeux dans le canal. Il est donné pour les trois points de fonctionnement gazeux dans le Tableau 3.21.

Vitesse moyenne dans le canal [m.s^{-1}]	40	60	70
Temps de passage dans le canal [ms]	2.20	1.47	1.26

FIGURE 3.21 – Temps de passage de l'écoulement gazeux dans le canal pour les différents points de fonctionnement de la configuration de Gepperth et al. (2012).

Dans un premier temps, le calcul de l'écoulement est réalisé en utilisant un schéma numérique de Lax-Wendroff pendant un temps correspondant à 40 temps de passage dans la zone d'intérêt. Puis, dans un second temps, le calcul est poursuivi durant 10 temps de passage supplémentaires avec un schéma TTGC. Le nombre conséquent de temps de passage réalisés permet d'assurer la bonne convergence des calculs comme le montre la courbe d'évolution de l'énergie cinétique au cours du temps en Figure 3.22 obtenue pour chacun des maillages au point de fonctionnement gazeux U60. Les courbes d'évolution pour les autres points de fonctionnement sont disponibles dans l'annexe A.

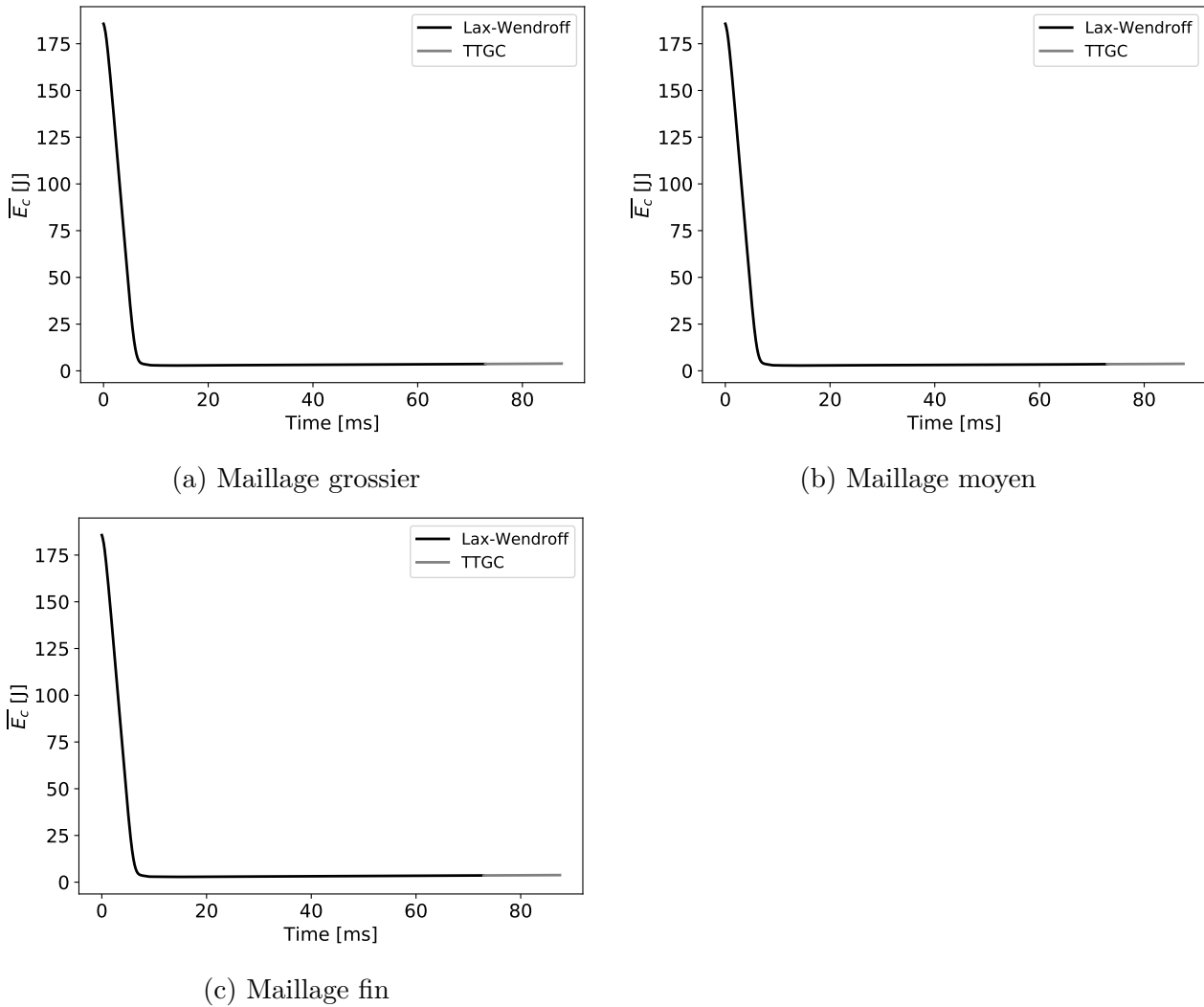


FIGURE 3.22 – Courbes de convergence de l'énergie cinétique dans le domaine \bar{E}_c des calculs purement gazeux de la configuration de Gepperth et al. (2012) au point de fonctionnement U60 pour les différents maillages utilisés.

Injection du liquide et extraction des grandeurs pour la calibration

Une fois l'écoulement gazeux convergé, le liquide commence à être injecté dans le domaine. Comme observé dans la Figure 3.23, toutes les gouttes injectées ($ptcl_type = 1$) viennent former un film en paroi ($ptcl_type = 2$) puis s'écoulent le long de la paroi du préfilmeur. La hauteur

du film ainsi que le frottement en paroi sont enregistrés durant leur trajet selon le processus de moyenne glissante explicité dans la partie 3.6.2. Rappelons que le choix d'une moyenne sur 2000 itérations est purement arbitraire et permet simplement d'éviter l'influence d'une oscillation à haute fréquence de ces grandeurs.

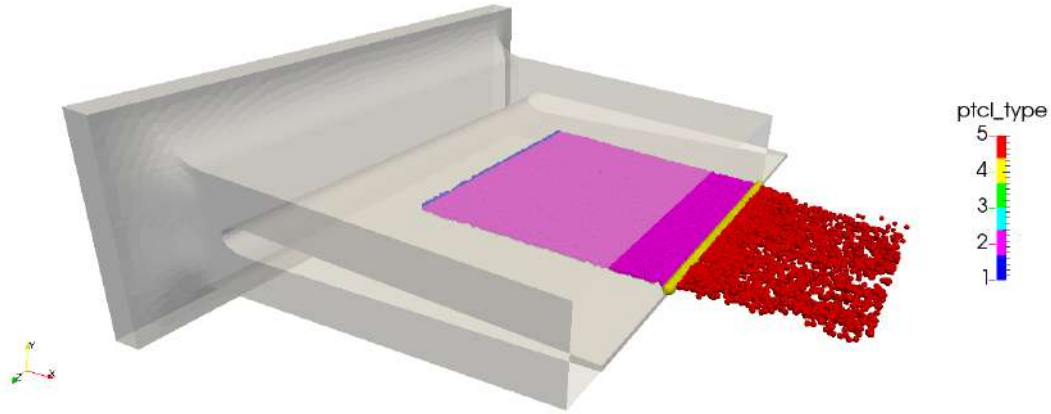


FIGURE 3.23 – Visualisation de l'évolution des gouttes entre leur injection et leur passage au niveau de la lèvre du préfilmeur dans les calculs de calibration du modèle Automatic-PAMELA sur la configuration de Gepperth et al. (2012). La taille des gouttes est augmentée d'un facteur 10. Ces dernières sont coloriées par leur type (ptcl_type). Les gouttes qui viennent d'être injectées dans l'écoulement sont de type 1. Celle qui forment le film liquide sont de type 2. Les gouttes en accumulation au niveau de la lèvre du préfilmeur sont de type 4 et prennent le type 5 une fois relâchées dans l'écoulement en aval du préfilmeur.

Lorsqu'une particule arrive au niveau du bord d'atomisation, elle commence son processus d'accumulation (ptcl_type = 4) puis enregistre la cellule courante comme une cellule d'accumulation dans le cas où elle n'avait pas été repérée précédemment dans le calcul. Une fois le processus d'accumulation terminé, l'épaisseur de la couche limite gazeuse est déterminée via l'algorithme de détection détaillé dans la partie 3.6.2 exécuté sur le profil moyenné tout au long du calcul de la vitesse au-dessus de la cellule d'accumulation. La hauteur du film, le cisaillement en paroi ainsi que l'épaisseur de la couche limite sont ensuite écrits dans un fichier et la particule est relâchée dans l'écoulement sans subir d'atomisation (ptcl_type = 5). Cette procédure est particulièrement intéressante puisqu'elle donne exactement les valeurs qui serviront en entrée des corrélations du modèle Automatic-PAMELA pour déterminer la distribution de tailles des gouttes à injecter. Elle permet ainsi une calibration fine des corrélations du modèle.

Les valeurs moyennes obtenues pour les différents maillages et les deux types de liquides sont présentées en fonction de la vitesse moyenne de l'écoulement en Figure 3.24. Conformément à ce qui est attendu, le cisaillement gazeux en paroi (Figure 3.24a) augmente bien avec la vitesse du gaz. La présence du liquide n'ayant pas d'influence sur cette grandeur, une seule valeur est présentée par point de fonctionnement et par maillage. Bien que le cisaillement en paroi soit légèrement surestimé dans le cas du maillage grossier, les maillages moyen et fin convergent vers des valeurs similaires quel que soit le point de fonctionnement. L'épaisseur du film liquide (Figure 3.24b) apparaît quant à elle dépendante des propriétés du liquide mais indépendante du maillage soulignant la robustesse de la méthode utilisée pour l'estimer. Malgré l'écart important d'épaisseur de film liquide entre les deux liquides ($h_f = 237 \mu\text{m}$ pour le point de fonctionnement U40D70 contre $h_f = 412 \mu\text{m}$ pour U40Prop sur le maillage fin), la vitesse de cisaillement gazeux

obtenue à partir de l'équation (3.71), et présentée en Figure 3.24c, est quasiment la même pour les deux liquides et admet le même comportement en maillage que le cisaillement en paroi. Ceci met en lumière l'influence prépondérante de ce dernier terme dans l'équation (3.71) par rapport à la hauteur du film liquide.

Comme le montre la Figure 3.24d, la hauteur de la couche limite gazeuse est très peu dépendante de la vitesse moyenne de gaz sur la plage de calibration considérée. En effet, même si une très légère inflexion de la courbe est observable avec l'augmentation de la vitesse moyenne de gaz, les valeurs obtenues sont quasiment constantes. Ce comportement est en bon accord avec la corrélation proposée par White (1991) (équation (3.74)). En revanche, l'observation de la Figure 3.24d permet de constater que le maillage a une certaine influence sur les niveaux obtenus (sans toutefois impacter l'ordre de grandeur qui reste en bon accord avec la prédiction de la corrélation de White (1991)). Contrairement aux grandeurs précédemment discutées, les valeurs prédites par les maillages moyen et fin sont ici différentes ce qui dénote d'une convergence en maillage moins rapide de cette grandeur. Toutefois, si l'écart entre les maillages grossier et moyen est important ($\Delta\delta_g = 2.82 - 1.40 = 1.42$ mm pour une vitesse moyenne de gaz U40), elle devient déjà nettement plus faible entre les maillages moyen et fin ($\Delta\delta_g = 1.40 - 0.86 = 0.54$ mm pour une vitesse moyenne de gaz U40). Même si une augmentation de la résolution permettrait in fine d'obtenir une valeur convergée de l'épaisseur de la couche limite, une telle résolution spatiale en paroi ne pourrait certainement pas être utilisée dans un calcul d'injecteur. Nous avons donc choisi de baser la recalibration des corrélations sur le maillage moyen dont la résolution est représentative d'un cas d'injecteur. Bien qu'il existe une erreur de prédiction sur l'épaisseur de la couche limite, ce maillage est parfaitement capable de fournir un ordre de grandeur. De plus, l'erreur commise est de l'ordre de celle qui serait obtenue dans un cas d'injecteur. Pour finir, comme nous le verrons dans la partie 3.6.5, ce paramètre n'a aucune influence sur le diamètre moyen de Sauter de la distribution prédit et une influence très limitée sur la distribution de tailles de gouttes. Même entachée d'une erreur, une simple estimation est donc considérée comme suffisante pour déterminer la distribution de tailles de gouttes.

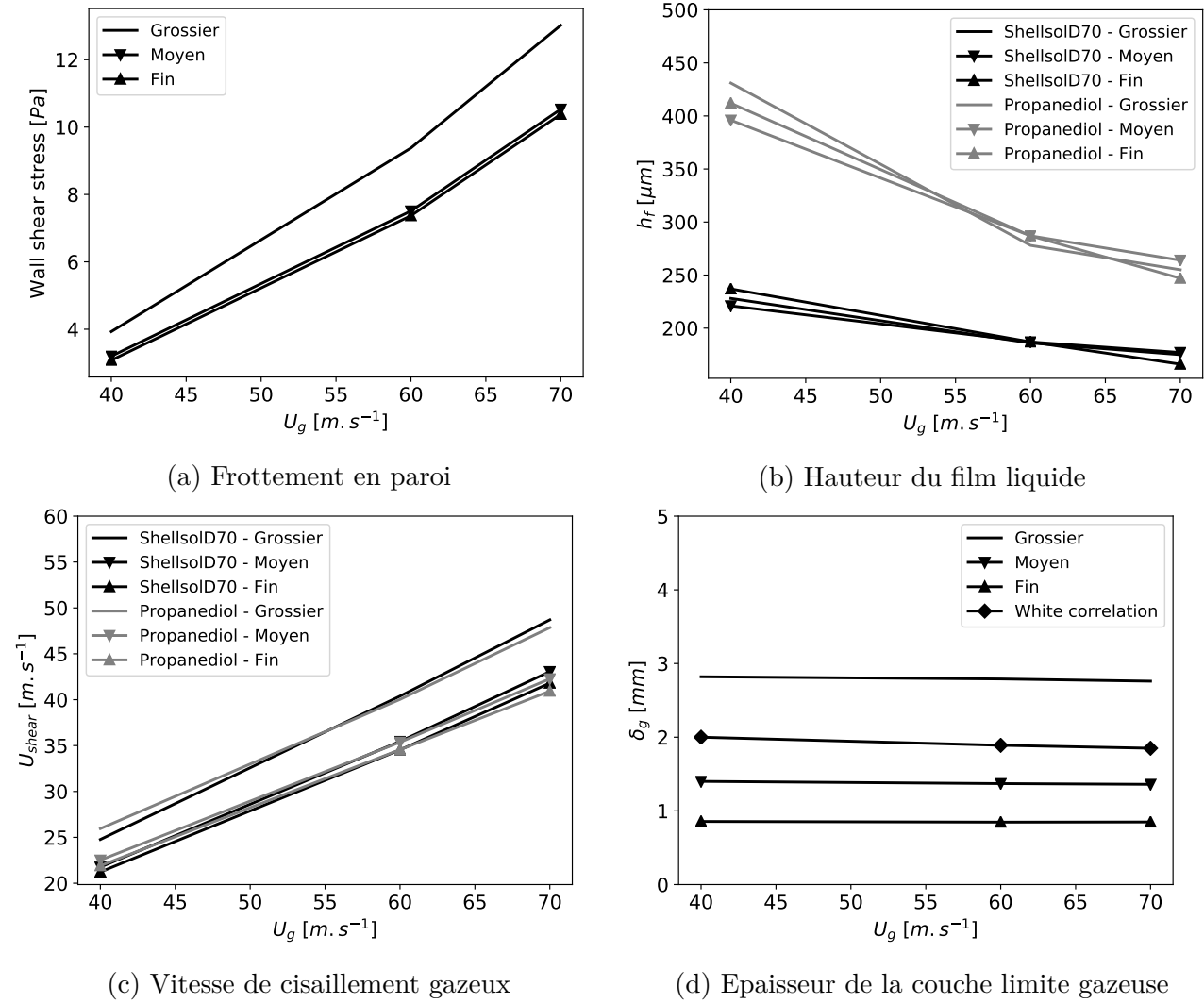


FIGURE 3.24 – Evolution des valeurs moyennes, vues par le modèle Automatic-PAMELA, du cisaillement en paroi τ_w , de la hauteur de film h_f , de la vitesse de cisaillement U_{shear} et de l'épaisseur de couche limite δ_g en fonction de la vitesse moyenne de l'écoulement. Elles sont obtenues pour les différents maillages (grossier, moyen et fin) et les deux types de liquides (Shellsol D70 et 1 : 1 vol. mix. : H₂O-1,2-Propanediol).

3.6.4 Calibration des constantes du modèle Automatic-PAMELA

Comme expliqué dans la partie précédente, les constantes des corrélations du modèle de Chaussonnet et al. (2016) sont recalibrées en utilisant les valeurs de vitesse locale de gaz $u_g = U_{shear}$ et d'épaisseur de couche limite δ_g extraites des calculs sur le maillage moyen en entrée et les distributions expérimentales mesurées par Gepperth et al. (2012).

En combinant les équations (3.59) et (3.63), il est possible de relier le diamètre de Sauter de la distribution au nombre de Weber $We_{h_{pref}}$ basé sur l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur :

$$\frac{D_{32}}{h_{pref}} = \frac{C_{12}}{\sqrt{We_{h_{pref}}}} \quad (3.81)$$

La Figure 3.25 montre le diamètre de Sauter D_{32} expérimental normalisé par l'épaisseur de la

lèvre du préfilmeur h_{pref} en fonction de $1/\sqrt{We_{h_{pref}}}$ pour différentes vitesses de gaz, épaisseurs de lèvre du préfilmeur et propriétés du liquide. Elle permet d'observer que la relation linéaire déterminée par Chaussonnet et al. (2016) entre ces deux grandeurs est toujours valable en utilisant des grandeurs locales. Le paramètre C_{12} est alors donné par le coefficient directeur de la droite de régression linéaire et vaut $C_{12} = 1.0643$. Notons que les paramètres C_1 et C_2 ne sont pas déterminés dans cette partie car leur connaissance n'est pas nécessaire au fonctionnement du modèle en utilisant l'équation (3.63) plutôt que l'équation (3.61) pour calculer la valeur de m .

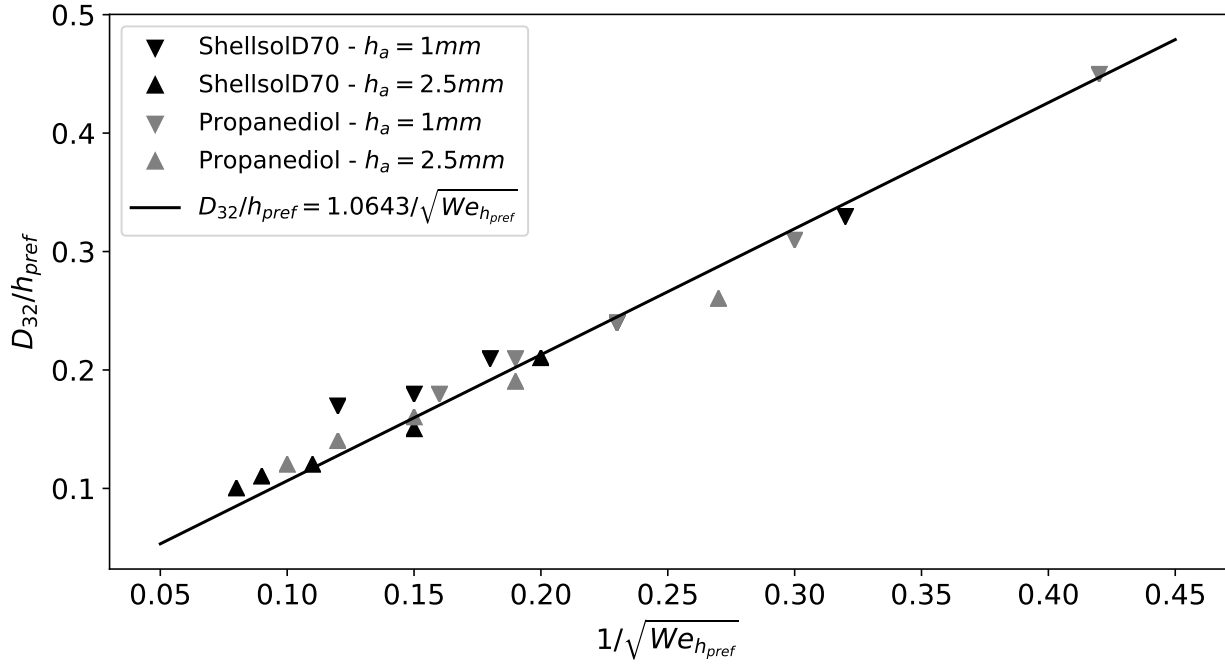


FIGURE 3.25 – Diamètres de Sauter D_{32} mesurés par Gepperth et al. (2012) normalisés par la hauteur de lèvre du préfilmeur h_{pref} en fonction de $1/\sqrt{We_{h_{pref}}}$ (symboles), où $We_{h_{pref}}$ est un nombre de Weber basé sur l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} . La ligne en pointillé représente la régression linéaire sur ces valeurs.

La détermination de la valeur du coefficient q de la distribution de Rosin-Rammler par l'équation (3.65) nécessite la connaissance du paramètre C_3 ainsi que de la fonction $g(h_{pref})$. Le premier est obtenu en traçant l'évolution du coefficient q issu des expériences en fonction de $1/\sqrt{We_{\delta_g}}$, où We_{δ_g} est le nombre de Weber basé sur l'épaisseur de la couche limite mesurée dans les calculs. Le résultat est présenté en Figure 3.26. Comme dans le cas de Chaussonnet et al. (2016), deux droites correspondant aux deux épaisseurs de la lèvre du préfilmeur sont bien visibles. Remarquons que le plateau à $q = 1.20$ observé par Chaussonnet et al. (2016) n'est pas présent ici. Ceci peut s'expliquer par une meilleure estimation de l'épaisseur de couche limite δ_g et en particulier de la vitesse locale u_g utilisée dans le nombre de Weber We_{δ_g} par rapport à Chaussonnet et al. (2016). Des régressions linéaires sont appliquées aux groupes de valeurs ayant la même épaisseur de lèvre du préfilmeur. Ceci conduit à deux valeurs de coefficients directeurs : 4.53 pour $h_{pref} = 1$ mm et 5.72 pour $h_{pref} = 2.5$ mm. Selon Chaussonnet et al. (2016), le coefficient directeur attendu devrait être le même pour les deux épaisseurs de lèvre

de préfilmeur mais un léger écart est créé par la différence d'incertitude lié à la dispersion entre les deux groupes de données (le groupe constitué des données où $h_{pref} = 2.5$ mm étant plus étalé dans le spectre de $1/\sqrt{We_{\delta_g}}$ que celui où $h_{pref} = 1$ mm). Dans le but d'avoir une unique valeur, le coefficient C_3 est choisi comme la valeur moyenne entre les deux coefficients directeurs $C_3 = 5.13$. Les droites obtenues pour chacun en utilisant C_3 comme coefficient directeur sont visibles sur la Figure 3.26. Les ordonnées à l'origine sont calculées pour chaque groupe de données dans le but de minimiser l'écart entre la droite de coefficient directeur C_3 et les points expérimentaux. Il peut être observé que les droites reproduisent très bien l'évolution expérimentale du paramètre q . L'écart plus important entre la droite et le point (0.34;2.12) peut être expliqué par le fait que l'incertitude de mesure expérimentale de la distribution est plus grande lorsque celle-ci a un champs de diamètres très étalé (q élevé). Ces ordonnées à

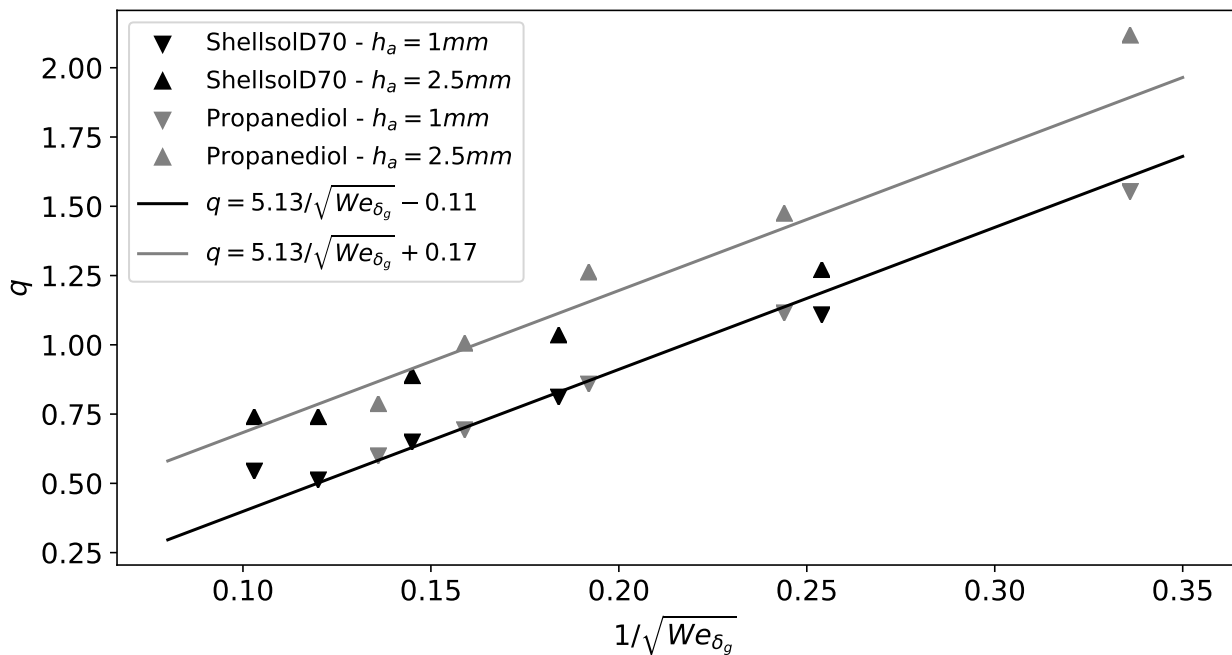


FIGURE 3.26 – Paramètres q des distributions de Rosin-Rammler issus des expériences de Gepperth et al. (2012) tracés en fonction de $1/\sqrt{We_{\delta_g}}$ (symboles), où We_{δ_g} est un nombre de Weber basé sur l'épaisseur de la couche limite de gaz δ_g . Les droites représentent les courbes

l'origine correspondent aux valeurs que doit prendre la fonction $g(h_{pref})$ (eq. (3.66)) en fonction de l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur. Les paramètres C_4 et C_5 de la fonction $g(h_{pref})$ sont alors déterminés pour que cette fonction passe par ces deux points. Ils valent respectivement $C_4 = 4.29 \cdot 10^{-3}$ et $C_5 = -1.68 \cdot 10^{-1}$. La Figure 3.27 montre l'évolution de $g(h_{pref})$ en fonction de l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} .

Les constantes issues de la calibration des corrélations du modèle Automatic-PAMELA sont résumées dans le Tableau 3.28. La Figure 3.29 compare les coefficients m et q de la distribution de Rosin-Rammler et le diamètre de Sauter D_{32} obtenus en utilisant les corrélations recalibrées du modèle Automatic-PAMELA avec les valeurs tirées des expériences de Gepperth et al. (2012). Elle montre que les corrélations permettent une prédiction satisfaisante des coefficients de la distribution de tailles de gouttes expérimentale. Il convient notamment de noter que le diamètre de Sauter D_{32} prédit est très proche des valeurs expérimentales. Ce diamètre étant

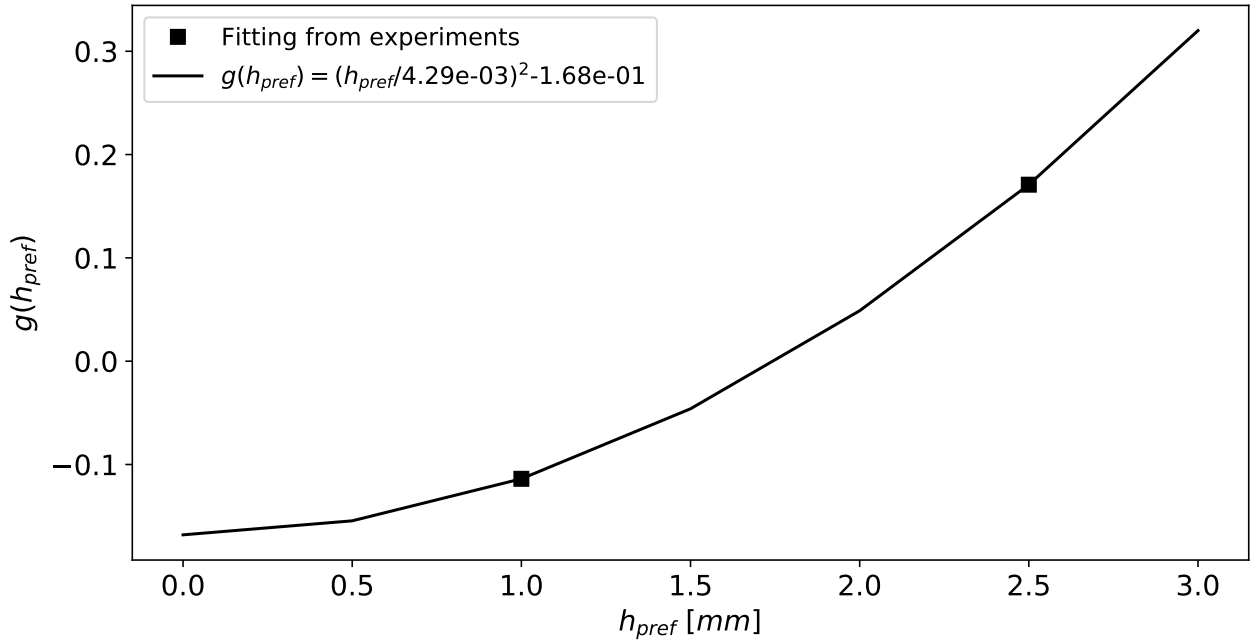


FIGURE 3.27 – Evolution de la fonction $g(h_{pref})$ (eq. (3.27)) obtenue à partir des ordonnées à l'origine des droites de la Figure 3.26 en fonction de l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} .

C_{12}	C_3	C_4	C_5
1.0643	5.13	4.29 mm	$-1.68 \cdot 10^{-1}$

FIGURE 3.28 – Valeurs des constantes du modèle Automatic-PAMELA.

la grandeur représentative du spray dans les phénomènes de combustion diphasique, le modèle Automatic-PAMELA est donc particulièrement intéressant pour simuler ces phénomènes.

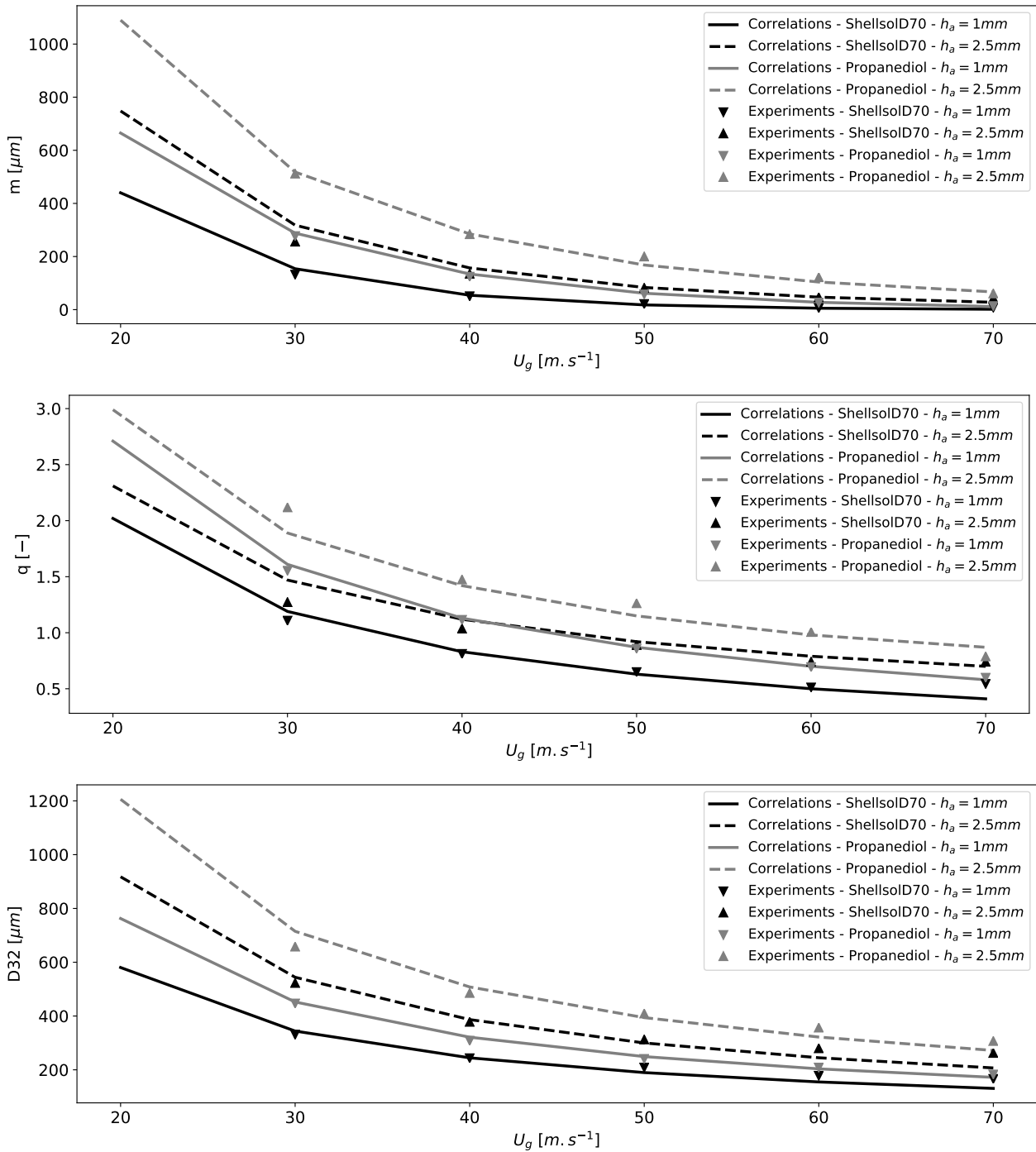


FIGURE 3.29 – Evolution des coefficients m et q de la distribution de tailles de gouttes de Rosin-Rammler et du diamètre de Sauter D_{32} en fonction de la vitesse moyenne du gaz U_g pour différentes épaisseurs de lèvre du préfilmeur et différents liquides. Les courbes donnent les valeurs données par les corrélations du modèle Automatic-PAMELA tandis que le nuage de points fournit les valeurs issues des expériences de Gepperth et al. (2012).

3.6.5 Sensibilité du modèle aux paramètres d'entrée

Le but de cette partie est d'étudier la réponse du modèle aux variations des différents paramètres d'entrée des corrélations du modèle Automatic-PAMELA. Ces paramètres sont les suivants :

- Vitesse de cisaillement du gaz
- Epaisseur de la couche limite
- Epaisseur de la lèvre du préfilmeur
- Propriétés physiques du gaz : masse volumique
- Propriétés physiques du liquide : masse volumique et tension de surface

L'étude de sensibilité est menée à partir d'un état de référence défini par les valeurs au point de fonctionnement U70D70 avec une épaisseur de préfilmeur de $h_{pref} = 2.5$ mm sur le maillage moyen. Les valeurs de référence sont données dans le Tableau 3.30.

u_g [m.s ⁻¹]	43.06
δ_g [mm]	1.36
h_{pref} [mm]	2.5
ρ_g [kg.m ⁻³]	1.17
ρ_l [kg.m ⁻³]	770
σ [kg.s ⁻¹]	$27.5 \cdot 10^{-3}$

FIGURE 3.30 – Valeurs de référence pour l'étude de sensibilité : paramètres au point de fonctionnement U70D70 avec une épaisseur de préfilmeur $h_{pref} = 2.5$ mm sur le maillage moyen.

La sensibilité des corrélations à un paramètre est étudiée en le faisant varier sur une plage comprise entre -50% et $+50\%$ de sa valeur de référence tout en gardant les autres paramètres d'entrée constants. Les évolutions des paramètres de taille m et de forme q de la distribution ainsi que du diamètre de Sauter D_{32} prédits sont ensuite discutées. La densité de probabilité de la distribution volumique de tailles de gouttes est également tracée en trois points du domaine de variation : au point de référence, à -50% de la référence et à $+50\%$ de la référence. Ces distributions sont accompagnées du diamètre de Sauter D_{32} et des diamètres D_{v10} et D_{v90} à partir desquels respectivement 10% et 90% du volume total de la distribution sont représentés. Ces deux diamètres donnent des informations sur l'étalement entre les petits et les gros diamètres de la distribution. Soit $F_3(d)$ la distribution cumulative volumique de tailles de gouttes, $f_3(d)$ sa densité de probabilité volumique et V_{tot} le volume totale de la distribution, les diamètres D_{v10} et D_{v90} sont définis par les formules suivantes :

$$F_3(D_{v10}) = \frac{1}{V_{tot}} \int_0^{D_{v10}} f_3(D) dD = 0.1 \quad (3.82)$$

$$F_3(D_{v90}) = \frac{1}{V_{tot}} \int_0^{D_{v90}} f_3(D) dD = 0.9 \quad (3.83)$$

Influence de la vitesse de cisaillement du gaz u_g

La Figure 3.31a montre que la vitesse de cisaillement gazeux affecte de façon importante la distribution de tailles de gouttes. Plus la vitesse de cisaillement est élevée et plus la distribution est piquée (q faible) et centrée sur des tailles de gouttes petites (m faible). Le diamètre

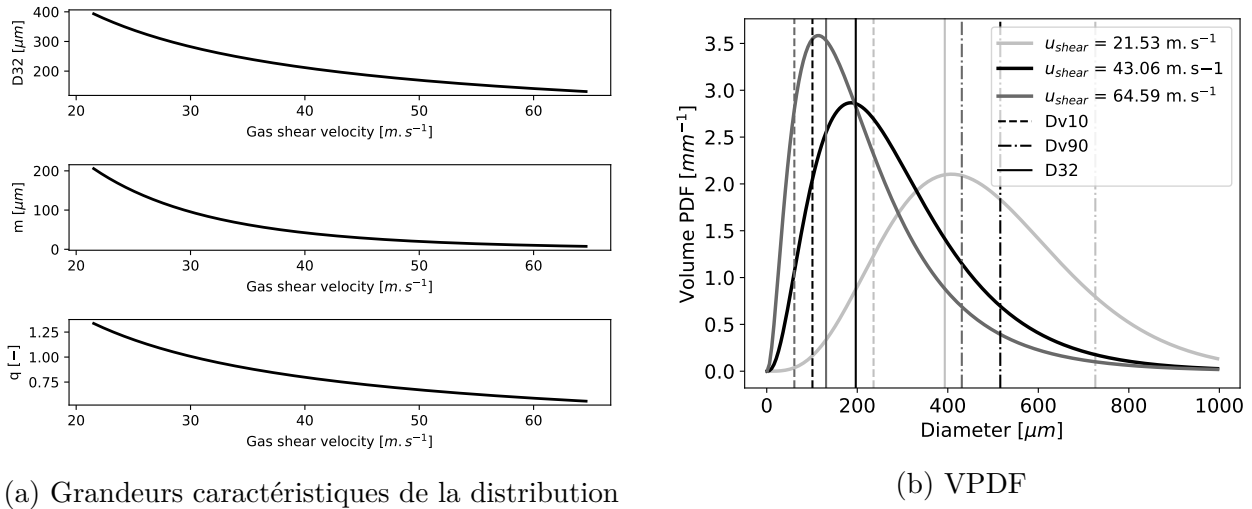


FIGURE 3.31 – Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de la vitesse de cisaillement gazeux U_{shear} de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30.

de Sauter D_{32} est en conséquence fortement impacté. Ainsi, une réduction de -50% de la vitesse de cisaillement gazeux engendre une augmentation de ce diamètre de $+197 \mu\text{m}$ tandis qu'une augmentation de la vitesse de $+50\%$ le fait diminuer de $-66 \mu\text{m}$. Même si la variation semble moins importante pour les fortes vitesses de cisaillement gazeux, elle est tout de même significative et, comme le montre la Figure 3.31b, la distribution de tailles de gouttes et les diamètres caractéristiques correspondants sont très différents. La vitesse de cisaillement gazeux joue donc un rôle de première importance pour la prédiction de la distribution de tailles de gouttes par le modèle. Notons que ce comportement est en bon accord avec les conclusions de nombreuses études expérimentales dont Lefebvre (1980), Jasuja (1981), Sattelmayer & Wittig (1986), Aigner & Wittig (1988), Beck et al. (1991), Bhayaraju & Hassa (2009).

Influence de l'épaisseur de couche limite

Comme le montre la Figure 3.32, l'épaisseur de la couche limite a une influence sur la taille m et la forme q de distribution de tailles de gouttes mais, n'a aucune influence sur la prédiction du diamètre de Sauter de la distribution D_{32} . Ce résultat est particulièrement intéressant puisque, comme évoqué dans la partie 3.6.3, cette grandeur est difficile à estimer précisément dans une simulation. Or, le rapport volume sur surface d'un spray de goutte, matérialisé par le D_{32} , représente sa capacité à s'évaporer. La prédiction de ce diamètre est donc de première importance pour la simulation de phénomènes en partie pilotés par l'évaporation comme la combustion d'un spray. De plus, avec un écart maximum à la valeur de référence de $+10 \mu\text{m}$ sur la plage de valeurs d'épaisseur de couche limite considérées, le diamètre D_{v10} , et donc la proportion de petits diamètres dans la distribution, est également peu impacté par cette grandeur. L'épaisseur de couche limite δ_g a cependant une influence sur les gros diamètres. Toutefois, avec une variation du D_{v90} de $-80 \mu\text{m}$ pour le cas à -50% de la valeur de référence et de $+45 \mu\text{m}$ pour le cas à $+50\%$ de la valeur de référence, cette influence reste limitée. La distribution de tailles de gouttes est donc globalement peu sensible à l'épaisseur de couche

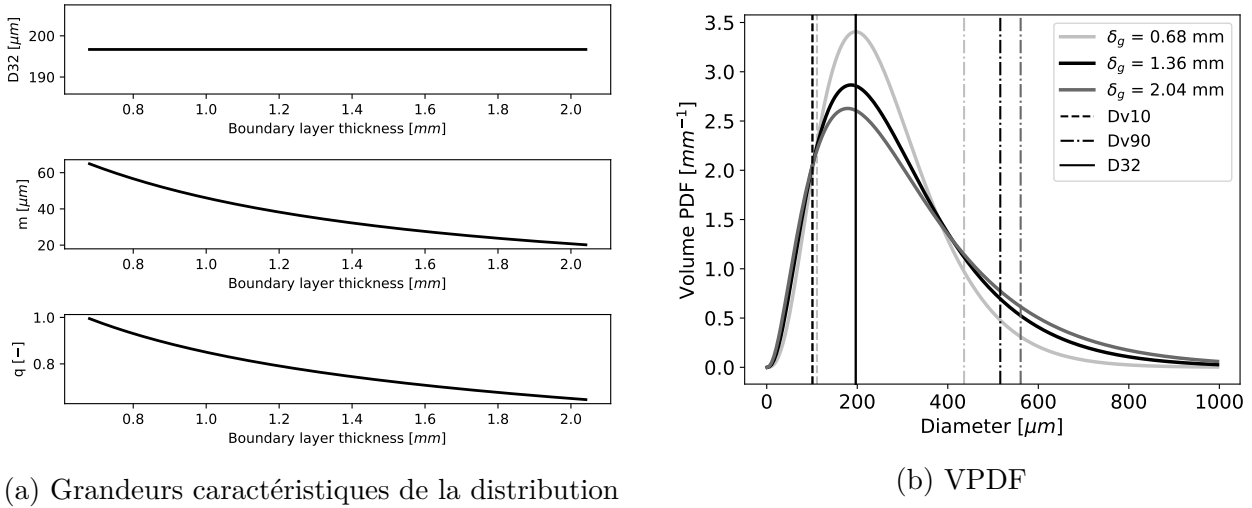


FIGURE 3.32 – Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de la hauteur de couche limite gazeuse δ_g de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30.

limite.

Influence de la hauteur de préfilmeur

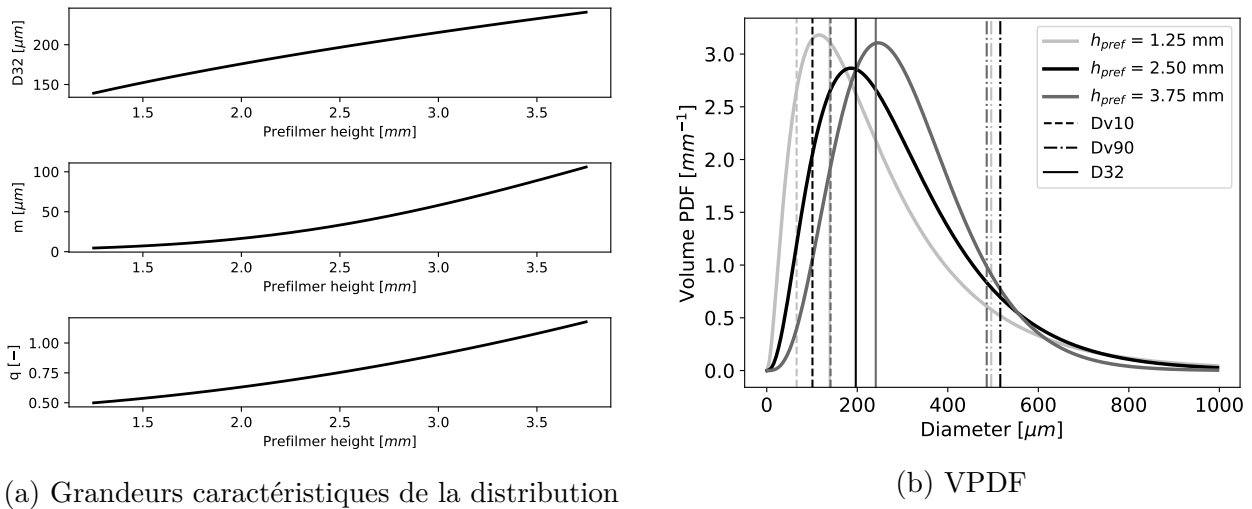
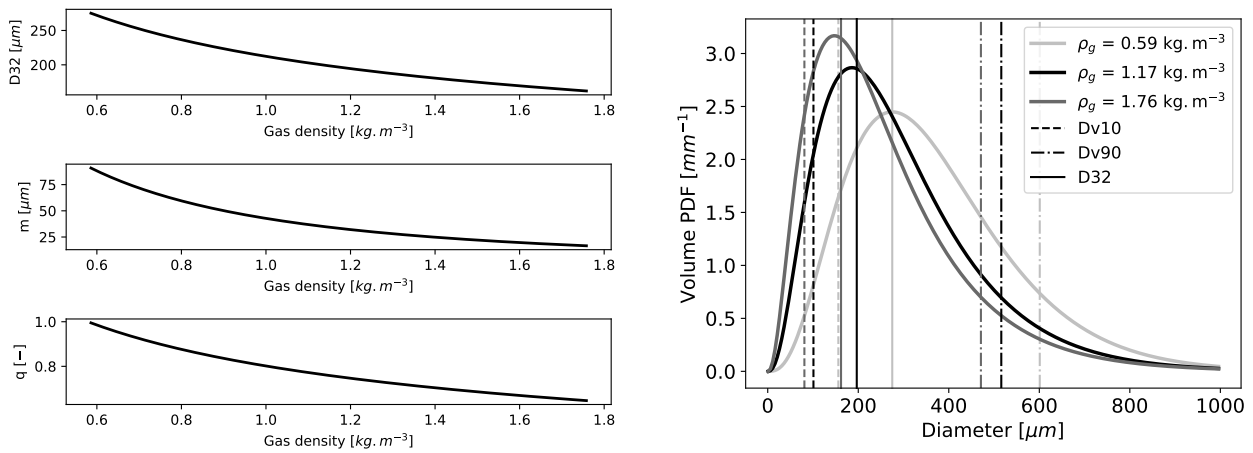


FIGURE 3.33 – Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30.

La hauteur de la lèvre du préfilmeur h_{pref} pilote la taille du réservoir de liquide qui s'accumule au niveau du bord d'atomisation. Or, plus la taille du réservoir est grande et plus la taille des gouttes formées peut être importante. La Figure 3.33 montre que cette évolution de la taille

des gouttes en fonction de la hauteur de lèvre est bien décrite par les corrélations du modèle. Il est, en effet, observé que les paramètres de taille m et de forme q de la distribution augmentent avec l'épaisseur de la lèvre. Ceci signifie que l'augmentation de cette grandeur décale la distribution de tailles de gouttes vers les gros diamètres (augmentation de m) et la pique de plus en plus (augmentation de q). Le diamètre de Sauter varie alors de $-58 \mu\text{m}$ pour le cas à -50% de la valeur de référence et de $+44 \mu\text{m}$ pour le cas à $+50\%$ de la valeur de référence. Le D_{v10} varie également sensiblement avec $-35 \mu\text{m}$ pour le cas à -50% de la valeur de référence et $+40 \mu\text{m}$ pour le cas à $+50\%$ de la valeur de référence. En revanche, le D_{v90} est moins influencé par la modification de l'épaisseur du préfilmeur et diminue même légèrement. Il varie de $-10 \mu\text{m}$ pour le cas à -50% de la valeur de référence et de $-20 \mu\text{m}$ pour le cas à $+50\%$ de la valeur de référence. L'évolution des diamètres D_{32} , D_{v10} et D_{v90} illustre bien le resserrement de la plage de tailles de gouttes de la distribution avec l'augmentation de l'épaisseur du préfilmeur.

Influence des propriétés du gaz



(a) Grandeurs caractéristiques de la distribution

(b) VPDF

FIGURE 3.34 – Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de la masse volumique du gaz ρ_g de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30.

La Figure 3.34 montre que l'augmentation de la masse volumique du gaz ρ_g engendre une réduction du diamètre de Sauter D_{32} prédit par le modèle. Cette évolution est physiquement cohérente puisqu'un accroissement de la masse volumique du gaz a pour conséquence d'augmenter la quantité de mouvement du gaz $\rho_g u_g^2$, et donc le cisaillement du liquide par le gaz. La distribution de tailles de gouttes est de plus en plus piquée et se décale vers les petits diamètres avec l'augmentation de la masse volumique du gaz ρ_g . Les diamètres caractéristiques D_{v10} et D_{v90} suivent également cette tendance. Notons qu'une variation de -50% de la masse volumique du gaz engendre une modification de $+78 \mu\text{m}$ du D_{32} tandis qu'une augmentation de $+50\%$ de cette grandeur fait diminuer le diamètre D_{32} de $-35 \mu\text{m}$. Bien que l'impact de la masse volumique du gaz sur le diamètre de Sauter soit plus faible que celle de la vitesse de cisaillement gazeux, il reste important, et fait de cette grandeur une des variables d'influence majeure pour la détermination de la distribution de tailles de gouttes.

Influence des propriétés du liquide

Deux propriétés du liquide sont prises en compte dans le modèle (sa masse volumique ρ_l ainsi que son coefficient de tension de surface σ) tandis que l'influence de sa viscosité μ_l sur la distribution de tailles de gouttes est négligée. Cette dernière hypothèse est parfaitement recevable dans la gamme de viscosité des fuels utilisés dans les injecteurs où les observations expérimentales de Lefebvre (1980), Jasuja (1981), Sattelmayer & Wittig (1986) ont conclu que cette grandeur avait un effet limité sur la distribution de tailles de gouttes.

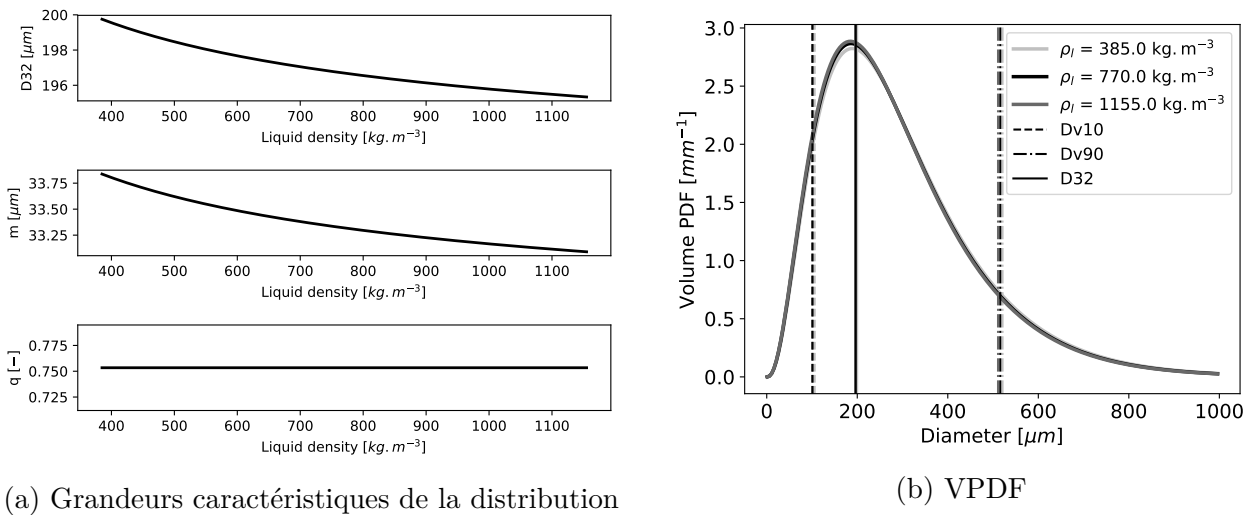
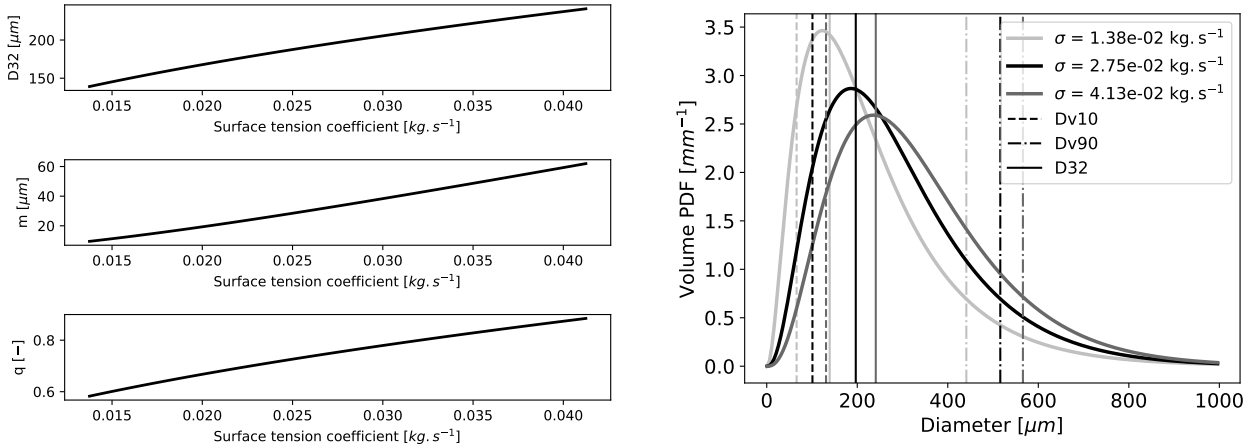


FIGURE 3.35 – Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation de la masse volumique du liquide ρ_l de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30.

Comme le montre la Figure 3.35, bien qu'il soit pris en compte, l'effet de la masse volumique du liquide est également négligeable. En effet, la variation de ce paramètre n'a pas d'influence sur la forme de la distribution (paramètre q) et un impact très faible sur le paramètre de taille m . Les distributions obtenues en faisant varier la masse volumique entre -50% et $+50\%$ de la valeur de référence sont donc quasiment identiques. Le diamètre de Sauter évolue de $+3 \mu\text{m}$ pour le cas à -50% de la valeur de référence et de $-1 \mu\text{m}$ pour le cas à $+50\%$ de la valeur de référence.

Le coefficient de tension de surface du liquide σ a quant à lui une influence non-négligeable sur la distribution de tailles de gouttes. En effet, la force de tension de surface à laquelle il est associé est une force stabilisatrice pour le liquide qui agit contre le processus d'atomisation. Un coefficient de tension de surface plus élevé doit donc être à l'origine de la formation de gouttes de plus gros diamètres (Lefebvre 1980, Jasuja 1981, Sattelmayer & Wittig 1986). La Figure 3.36 montre que ce phénomène est bien reproduit par les corrélations du modèle où un accroissement de la tension de surface engendre une augmentation des paramètres de taille m et de forme q de la distribution de tailles de gouttes. La distribution de tailles de gouttes se déplace alors vers les plus gros diamètres ce qui augmente les diamètres caractéristiques D_{v10} , D_{v90} et D_{32} . Ce dernier diamètre varie de $-58 \mu\text{m}$ pour le cas à -50% de la valeur de référence et de $+42 \mu\text{m}$ pour le cas à $+50\%$ de la valeur de référence. Ces variations sont élevées et sont notamment de l'ordre de celles observées pour la masse volumique du gaz. Le coefficient de



(a) Grandeurs caractéristiques de la distribution

(b) VPDF

FIGURE 3.36 – Sensibilité de densité de probabilité volumique de tailles de gouttes de la distribution de Rosin-Rammler (VPDF) et des grandeurs caractéristiques associées prédites par le modèle Automatic-PAMELA à une variation du coefficient de tension de surface du liquide σ de -50% à $+50\%$ autour du point de référence défini dans le Tableau 3.30.

tension de surface est donc une variable importante pour la prédiction de la distribution de tailles de gouttes.

Classification des paramètres selon leur influence sur le diamètre de Sauter

Comme évoqué précédemment, le diamètre de Sauter D_{32} est le paramètre représentatif de la distribution pour l'évaporation des gouttes. Or, ce phénomène pilote en grande partie la combustion du spray issu d'un injecteur aéronautique. Ceci fait du diamètre de Sauter D_{32} une des grandeurs les plus importantes pour le contrôle de la combustion du spray. Il est donc très intéressant de classifier l'impact des différents paramètres physiques sur la taille de ce diamètre. La Figure 3.37 donne l'évolution du diamètre de Sauter D_{32} en faisant varier chaque paramètre d'entrée du modèle de -50% à $+50\%$ de sa valeur de référence. Comme observé précédemment, il apparaît que la vitesse de cisaillement du gaz a une influence prépondérante sur le diamètre de Sauter avec un impact au minimum 57% supérieur aux autres grandeurs. La masse volumique du gaz, l'épaisseur du préfilmeur et le coefficient de tension de surface ont également un impact conséquent tandis que, comme discuté dans la partie précédente, la masse volumique du liquide et l'épaisseur de la couche limite de gaz affectent le diamètre de Sauter de façon négligeable. Il convient de remarquer que la vitesse de cisaillement et la masse volumique du gaz définissent, à travers la quantité de mouvement du gaz $\rho_g u_g^2$, l'intensité des forces aérodynamiques qui agissent sur le liquide. Une augmentation de l'une de ces quantités accroît les forces aérodynamiques ce qui conduit à faciliter la désintégration du liquide et donc à faire diminuer le diamètre de Sauter D_{32} . Comme le montre la Figure 3.37, l'influence de ces forces domine celles de la forces de tension de surface. De ce fait, il semble intéressant de jouer en premier lieu sur la vitesse de l'écoulement gazeux et/ou sur sa masse volumique (augmentation de pression par exemple) plutôt que l'épaisseur de la lèvres d'atomisation ou les propriétés physiques du liquide pour influencer sur la taille des gouttes formées et ainsi sur la qualité de combustion.

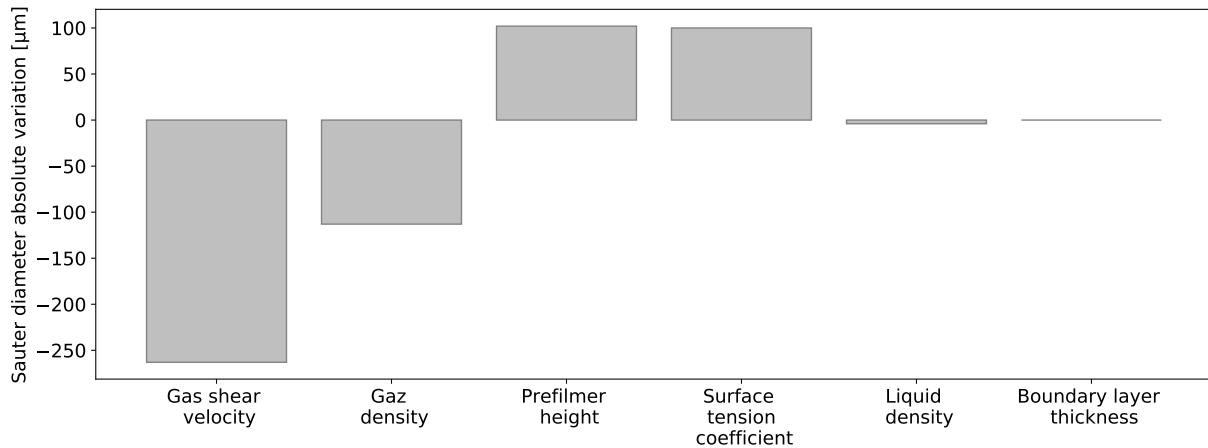


FIGURE 3.37 – Variation du diamètre de Sauter D_{32} prédit par le modèle Automatic-PAMELA lors de l'évolution des grandeurs d'entrée de -50% à $+50\%$ de leurs valeurs de référence. Les paramètres sont classés de la variation la plus importante à la plus faible.

3.6.6 Validation du modèle sur la configuration de Gepperth et al. (2012)

Le modèle Automatic-PAMELA est maintenant appliqué dans la configuration de Gepperth et al. (2012). Les calculs sont réalisés sur les points de fonctionnement de la matrice de cas du Tableau 3.15 avec le maillage moyen et les deux épaisseurs de lèvre du préfilmeur $h_{pref} = 1$ mm et $h_{pref} = 2.5$ mm. Le point de fonctionnement $U40D70$ avec une épaisseur de préfilmeur de 1 mm est également simulé avec les maillages grossier et fin afin de pouvoir discuter de l'influence du maillage sur les résultats. Les paramètres numériques utilisés sont les mêmes que ceux de la partie 3.6.3. Les champs initiaux correspondent aux écoulements gazeux établis dans la partie 3.6.3 avant les calculs de calibration.

La Figure 3.38 présente une visualisation du spray de gouttes obtenu pour le point de fonctionnement $U60Prop$ avec une hauteur de préfilmeur de 1 mm. Elle montre que le modèle est bien capable de générer un spray de gouttes au niveau du bord d'atomisation du préfilmeur. Afin d'étudier quantitativement le spray de gouttes généré par le modèle Automatic-PAMELA, le diamètre des gouttes est enregistré dans un fichier lors de leur injection en bout de préfilmeur par le modèle. Les calculs sont exécutés jusqu'à convergence de la distribution de tailles de gouttes dans le spray. Celle-ci est considérée comme atteinte lorsque les diamètres caractéristiques D_{v10} , D_{v90} et D_{32} varient de moins de 1% entre deux calculs.

Comparaison du spray généré par le modèle Automatic-PAMELA avec les résultats expérimentaux

Les résultats obtenus en utilisant le modèle Automatic-PAMELA sont comparés dans cette partie aux données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014). Notons que puisque le modèle a été calibré sur cette configuration, les résultats devraient être en parfait accord avec les expériences. Cependant, comme souligné par Chaussonnet (2014), deux limitations empêchent de retrouver ce comportement idéal. Tout d'abord, le modèle approxime la distribution par une fonction de Rosin-Rammler ce qui peut conduire à des déviations. Ensuite, la convergence parfaite de la distribution, et notamment

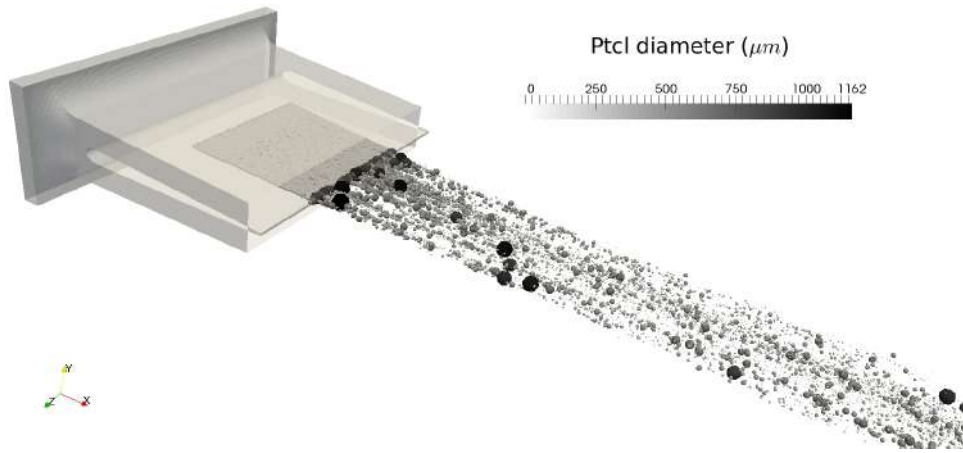


FIGURE 3.38 – Visualisation instantanée du spray généré par le modèle Automatic-PAMELA dans le calcul de la configuration de Gepperth et al. (2012) au point de fonctionnement $U60Prop$ avec une hauteur de préfilmeur 1 mm. La diamètre des gouttes est multiplié par un facteur 10.

des gros diamètres est difficile à obtenir numériquement.

Les diamètres caractéristiques D_{v10} , D_{v90} et D_{32} résultants des différents points de fonctionnement sont donnés dans la Figure 3.39. Les diamètres D_{v10} et D_{32} sont en très bon accord avec les données expérimentales. Le modèle Automatic-PAMELA implémenté dans le code AVBP permet donc de prédire précisément, d'une part, les petits diamètres de la distribution, et d'autre part, le rapport volume sur surface du spray (de première importance pour les phénomènes d'évaporation). Le diamètre D_{v90} est, quant à lui, légèrement sur-estimé dans les cas avec une épaisseur de la lèvre du préfilmeur de 1 mm et sous-estimé lorsque cette dernière vaut 2.5 mm. L'erreur moyenne de prédiction s'étale de $\approx 2\%$ pour $U_g = 40 \text{ m.s}^{-1}$ à $\approx 21\%$ pour $U_g = 60 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_g = 70 \text{ m.s}^{-1}$. Cette écart est attribué à la difficulté d'obtenir une bonne convergence des gros diamètres de la distribution. En effet, les gouttes de gros diamètres contiennent une partie non-négligeable du volume de liquide dans le spray. Or, leur proportion en nombre, et par conséquent la probabilité de tirer une tel diamètre lors d'un processus d'atomisation, y est très faible. Elle l'est d'autant plus que la distribution admet des tailles de gouttes petites (m faible) et que cette dernière est piquée (q faible), comme c'est le cas pour les fortes vitesses de gaz ($U_g = 60 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_g = 70 \text{ m.s}^{-1}$). Le temps d'acquisition des données étant bien inférieur dans les simulations par rapport aux expériences, l'obtention de la bonne proportion de gros diamètres dans le spray, et donc du bon D_{v90} , y est particulièrement difficile.

La Figure 3.40 compare les densités de probabilité volumiques de tailles de gouttes (VPDF) issues des calculs avec le modèle Automatic-PAMELA, pour une épaisseur de lèvre du préfilmeur de 1 mm, avec les résultats expérimentaux, d'une part, et ceux obtenus par Chaussonnet et al. (2016) avec le modèle PAMELA, d'autre part. Remarquons que les VPDF obtenues avec une épaisseur de lèvre de préfilmeur de 2.5 mm ne sont pas comparées par manque de données expérimentales à notre disposition. Les VPDF produites par le modèle Automatic-PAMELA avec une épaisseur de lèvre du préfilmeur de 1 mm sont similaires à celles obtenues par Chaussonnet et al. (2016) avec le modèle PAMELA. Ceci indique que la recalibration des constantes contenues dans les corrélations a été correctement réalisée. Les résultats sont également en très bon accord avec les VPDF expérimentales. Une faible convergence des queues de distribution (gros diamètres) peut cependant être observée. Elle est due à la difficulté d'obtenir la bonne proportion volumique de gros diamètres dans les calculs et conduit à l'erreur de prédiction

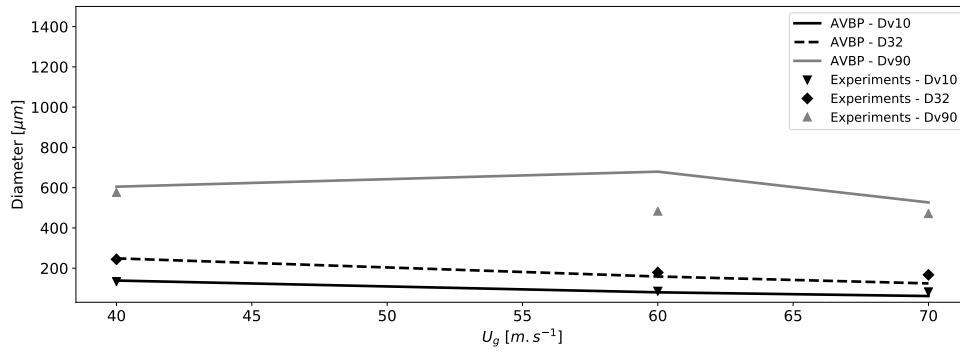
du D_{v90} expliquée précédemment. Néanmoins, il convient de noter que ce problème apparaît également dans les calculs de Chaussonnet et al. (2016) avec le modèle PAMELA, où il est particulièrement marqué pour le point de fonctionnement $U70D70$.

Influence du maillage sur le spray issu du modèle Automatic-PAMELA

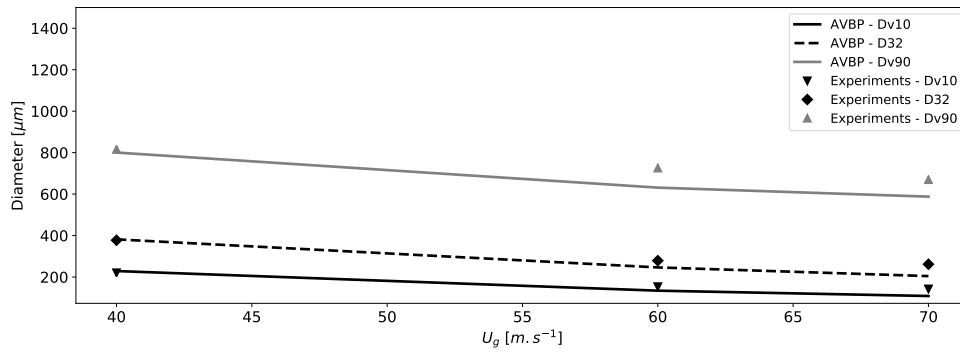
L'influence du maillage sur le modèle Automatic-PAMELA est maintenant étudiée en comparant les résultats obtenus à partir des maillages grossier, moyen et fin sur le point de fonctionnement $U40D70$ avec une épaisseur de lèvre de préfilmeur de 1 mm. Les VPDF sont données et comparées aux expériences dans la Figure 3.41 tandis que le Tableau 3.42 liste les valeurs des diamètres caractéristiques D_{32} , D_{v10} et D_{v90} .

La distribution obtenue avec le maillage grossier est la plus éloignée des valeurs expérimentales. Son pic est significativement décalé vers les petits diamètres par rapport à la VPDF expérimentale. La proportion de petits diamètres est donc trop importante ce qui engendre une sous-estimation du D_{v10} de 24% et du D_{32} de 16%. Cette erreur provient de la sur-évaluation de la vitesse de cisaillement par le maillage grossier (Figure 3.24c). Cette dernière conduit, via le nombre de Weber We_{pref} dans l'équation (3.63), à la prédiction d'une valeur trop faible du paramètre de taille m de la distribution de Rosin-Rammler. Ce décalage du pic disparaît pour les maillages moyen et fin où la vitesse de cisaillement est convergée. La distribution issue du maillage grossier apparaît également plus étalées que la VPDF expérimentale. Ce comportement peut être imputé non-seulement à la sous-estimation du paramètre de taille m de la Rosin-Rammler mais aussi de son paramètre de forme q . L'erreur sur ce dernier paramètre est causée par la combinaison de la sur-évaluation de la vitesse de cisaillement et de l'épaisseur de couche limite dans le nombre de Weber We_{δ_g} utilisé dans l'équation (3.65). L'étalement excessif de la distribution a pour conséquence de créer une erreur de prédiction importante de la proportion de gros diamètres dans la distribution matérialisée par un écart du diamètre D_{v90} de +42% par rapport à l'expérience.

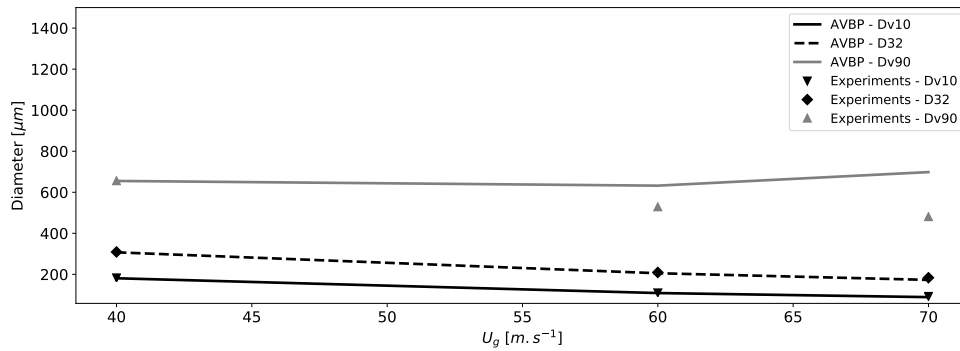
Les VPDF obtenues pour les maillages moyen et fin sont, quant à elles, en bon accord avec les expériences. Comme évoqué précédemment, la vitesse de cisaillement est convergée pour ces maillages et de ce fait la position des pics de distribution est la même. Cependant, il convient d'observer que la distribution issue du maillage fin est plus piquée que celle résultante du maillage moyen. Cette légère différence d'étalement est ici uniquement due à l'écart de prédiction de l'épaisseur de couche limite observé dans la Figure 3.24d qui engendre une erreur d'estimation du paramètre q de la Rosin-Rammler via l'équation (3.65). La VPDF produite sur maillage fin est alors impactée de façon similaire aux conclusions de l'analyse de sensibilité (section 3.6.5) : la diminution de la valeur de l'épaisseur de la couche limite prédite par rapport au maillage moyen, utilisé pour la recalibration, conduit à un resserrement des valeurs de la distribution autour de sa moyenne. Le diamètre D_{v10} , caractéristique des petites gouttes, est donc sur-estimé, tandis que, D_{v90} , représentant les grosses gouttes, est sous-estimé. Avec des écarts aux expériences sur les diamètres D_{v10} et D_{v90} de +10% et -9% pour le maillage fin contre +3% et +5% pour le maillage moyen, la prédiction de ces grandeurs caractéristiques du spray reste cependant très bonne sur le maillage fin. Il faut également noter que, conformément aux conclusions de l'analyse de sensibilité, le diamètre de Sauter D_{32} de la distribution n'est pas impacté par la variabilité de l'épaisseur de la couche limite entre les deux maillages. Ceci confirme l'hypothèse selon laquelle il n'est pas nécessaire d'assurer une estimation exacte de l'épaisseur de couche limite pour retrouver les caractéristiques principales du spray, et en particulier son diamètre de Sauter D_{32} .



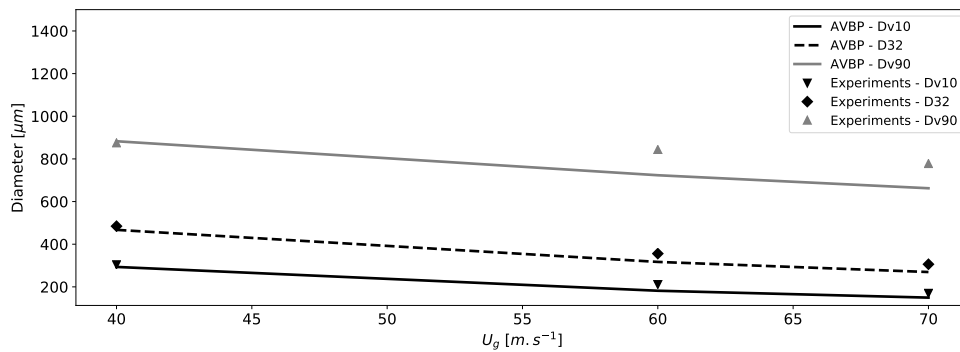
(a) Shellsol D70 - $h_{pref} = 1$ mm



(b) Shellsol D70 - $h_{pref} = 2.5$ mm

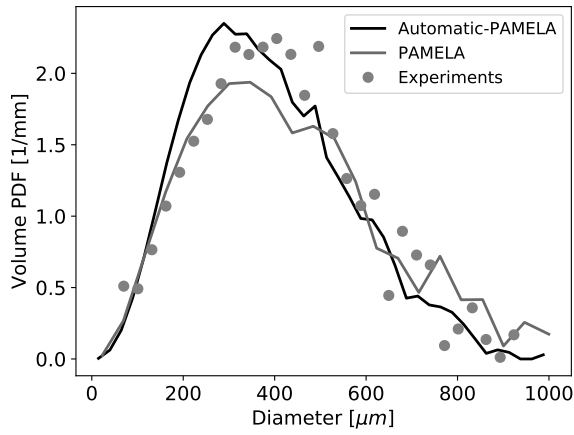


(c) 1 : 1 vol. mix. : H₂O-1,2-Propanediol - $h_{pref} = 1$ mm

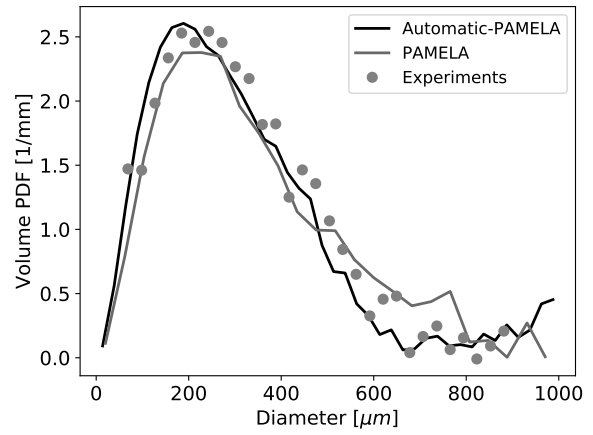


(d) 1 : 1 vol. mix. : H₂O-1,2-Propanediol - $h_{pref} = 2.5$ mm

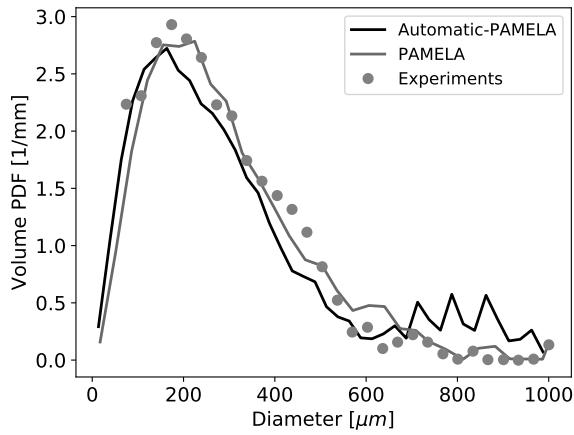
FIGURE 3.39 – Comparaison des diamètres caractéristiques obtenus avec le maillage moyen dans les calculs des différents points de fonctionnement de la matrice de cas 3.15 pour les épaisseurs de préfilm $h_{pref} = 1$ mm et $h_{pref} = 2.5$ mm avec les données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014).



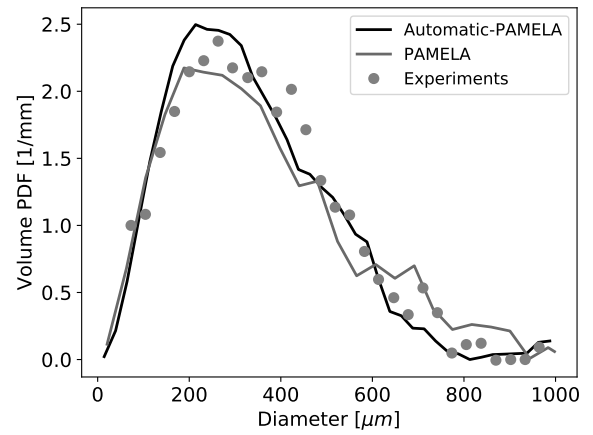
(a) *U40Prop*



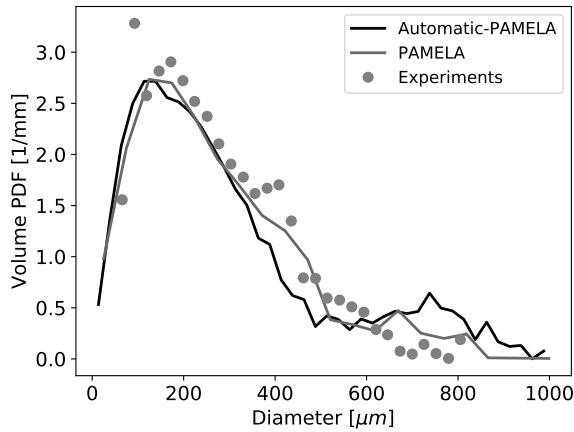
(b) *U60Prop*



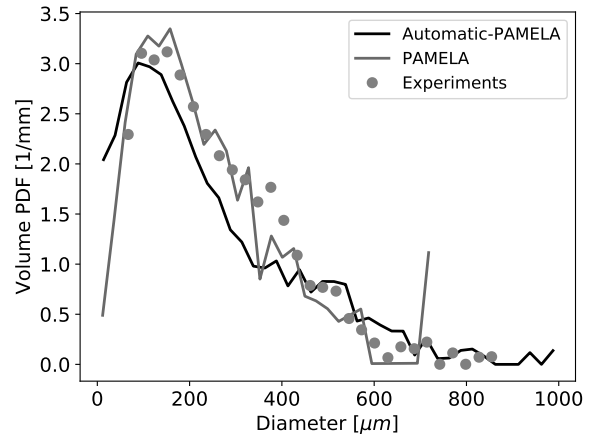
(c) *U70Prop*



(d) *U40D70*



(e) *U60D70*



(f) *U70D70*

FIGURE 3.40 – Comparaison des densités de probabilité volumique de tailles de gouttes obtenues avec le maillage moyen dans les calculs des différents points de fonctionnement de la matrice de cas 3.15 pour $h_{pref} = 1$ mm avec, d'une part, les données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014) et, d'autre part, les calculs avec le modèle PAMELA réalisés par Chaussonnet et al. (2016).

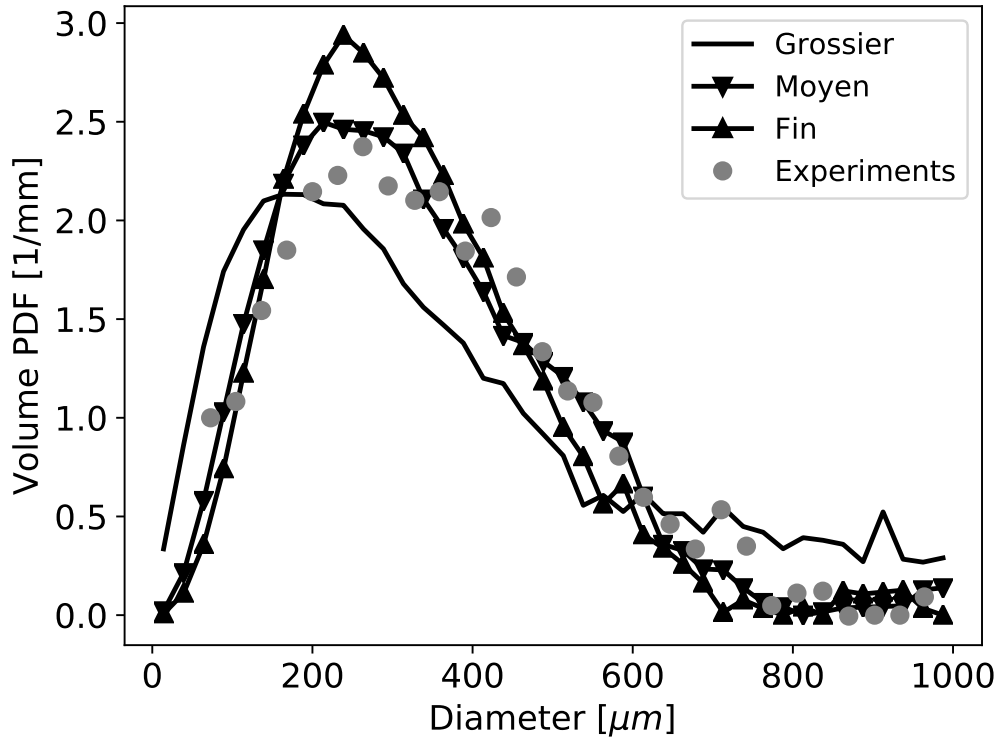


FIGURE 3.41 – Comparaison des densités de probabilité volumique de tailles de gouttes obtenues lors du calcul du point de fonctionnement $U40D70$ pour $h_{pref} = 1$ mm avec les maillages grossier, moyen et fin, d'une part, et les données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014), d'autre part.

Maillage	Grossier	Moyen	Fin	Expériences
D_{32} (μm)	204	249	250	244
D_{v10} (μm)	103	139	149	135
D_{v90} (μm)	817	605	524	575

FIGURE 3.42 – Comparaison des diamètres caractéristiques D_{32} , D_{v10} et D_{v90} obtenus lors du calcul du point de fonctionnement $U40D70$ pour $h_{pref} = 1$ mm avec les maillages grossier, moyen et fin, d'une part, et les données issues des expériences de Gepperth et al. (2012) et tirées de la thèse de Chaussonnet (2014), d'autre part.

3.7 Calcul d'une configuration d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur

Les modèles phénoménologiques précédemment développés sont maintenant appliqués à la simulation d'une configuration industrielle d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Le but de cette étude est d'effectuer une démonstration de l'applicabilité de cette approche pour prédire la distribution de tailles des gouttes issue du processus d'atomisation.

3.7.1 Configuration expérimentale

L'injecteur étudié est un injecteur industriel de type Airblast avec préfilmeur muni de deux rangées de vrilles (une interne et une externe) et de trous de bol. Sa géométrie est confidentielle et ne sera donc pas présentée en détails dans cette thèse. Toutefois, la Figure 3.43 en présente une coupe schématique. Le liquide est injecté sous forme d'un film via une ligne de carburant située en paroi entre les écoulements gazeux contrarotatifs issus des vrilles internes et externes. Lorsque le film liquide atteint le bord d'atomisation, il est fragmenté en gouttes par un processus d'atomisation primaire en bout de lèvre. Les gouttes ainsi formées sont ensuite entraînées par l'écoulement où elles subissent des fragmentations secondaires sous l'influence du fort cisaillement gazeux.

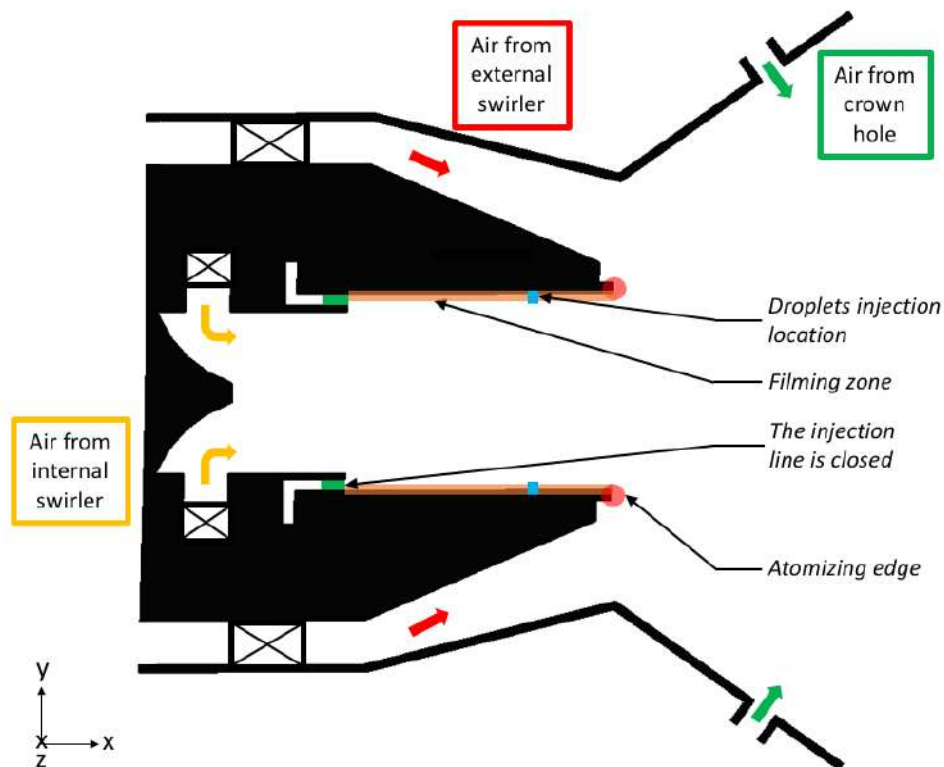


FIGURE 3.43 – Schéma de coupe dans le plan $Z = 0$ de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.

Le spray de gouttes ainsi formé a été caractérisé expérimentalement par des mesures de

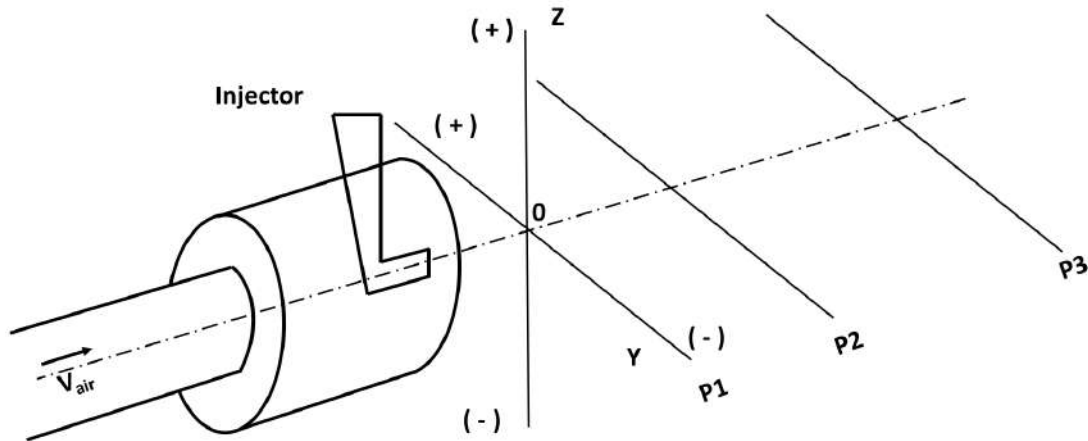


FIGURE 3.44 – Repères des mesures PDPA expérimentales réalisées pour caractériser le spray issu de l’injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.

Phase Doppler Particle Analyser (PDPA) réparties dans trois plans situés en aval du module d’injection, et appelés P1, P2 et P3. Dans chaque plan, les mesures ont été effectuées suivant 2 axes perpendiculaires à l’axe principal de l’injecteur. La Figure 3.44 rend compte de la configuration de mesure. Pour chacun des points de mesure disposé le long des axes de la Figure 3.44, la méthode PDPA fournit une valeur in situ et non-intrusive des tailles et des vitesses de gouttes.

Les expériences de caractérisation du spray ont été réalisées à pression atmosphérique ($P = 1$ atm) et température ambiante ($T = 25^{\circ}C$). Le débit gazeux correspond à une perte de charge (PdC) dans l’injecteur de 4%. Le liquide est injecté avec un débit $Q_{v,l}$ dont la valeur n’est pas donnée ici pour des raisons de confidentialité. Le gaz est de l’air ambiant tandis que le liquide utilisé est le méthanol. Ce dernier possède des propriétés similaires au Kérosène à pression atmosphérique et température ambiante. Le Tableau 3.45 liste à titre de comparaison quelques grandeurs caractéristiques de ces deux liquides. Notons pour finir qu’aucune caractérisation

Propriétés	Kérosène	Méthanol
Formule	$C_{12}H_{36}$	CH_3OH
Densité (à $15.5^{\circ}C$)	0.80	0.797
Tension superficielle [N/m]	0.027	0.022
Viscosité [m^2/s] (à $293K$)	$1.64E - 6$	$0.75E - 6$

FIGURE 3.45 – Comparaison des grandeurs caractéristiques du Kérosène et du Méthanol.

de l’écoulement gazeux n’a été réalisée à notre connaissance. La configuration de l’écoulement gazeux obtenue ne sera donc pas comparée avec les expériences.

3.7.2 Domaine de calcul et maillage

Le domaine de calcul considéré est représenté en Figure 3.46. Il est constitué de l’injecteur, du module expérimental d’injection qui est un dispositif permettant d’accueillir l’injecteur pour

les essais, ainsi que d'un large plénum hémisphérique pour simuler l'atmosphère. Les dimensions du plénum sont très grandes devant celle de l'injecteur pour ne pas contraindre l'écoulement en sortie d'injecteur (le rayon de l'hémisphère est environ 20 fois plus grand que celui de l'injecteur au niveau de sa sortie). Un écoulement co-courant d'air à 2 m.s^{-1} a également été ajouté dans la simulation pour faciliter l'évacuation des tourbillons qui se forment dans le plénum. La valeur de la vitesse est suffisamment faible pour ne pas altérer la dynamique de l'écoulement débitant de l'injecteur.

Afin de rendre possible le calcul de l'injecteur avec un formalisme Lagrangien, la ligne de carburant a été fermée et les gouttes sont directement injectées sous la forme d'un film liquide mince quelques millimètres avant le bord d'atomisation. L'établissement du film n'est donc pas simulé ce qui revient à faire l'hypothèse qu'il n'a pas d'impact sur la formation du spray et sur ses caractéristiques en sortie d'injecteur. Par ailleurs, il est supposé que les phénomènes d'arrachement de liquide sur le film sous l'effet du cisaillement gazeux, appelés "stripping", ont une influence négligeable sur la distribution de tailles des gouttes en sortie d'injecteur. Les travaux de Bhayaraju & Hassa (2006) sur une configuration plane ont montré que les phénomènes d'arrachement apparaissent lorsque le nombre de Weber de l'écoulement $We_f = \rho_g \delta_g U_g^2 / \sigma$ est supérieur à 100. Une estimation rapide de ce nombre dans la configuration présente conduit à une valeur d'environ $We_f \approx 90$. En supposant que cette règle s'applique dans le cas d'injecteurs annulaires, l'impact de l'arrachement de liquide sur la distribution de tailles de gouttes pourrait être pris en compte mais l'hypothèse de négliger ce phénomène apparaît également raisonnable.

La Figure 3.47 présente une vue globale du maillage dans un plan de coupe (x, y) en $z = 0$. Il est composé d'environ $10.5M$ d'éléments dont la majeure partie est utilisée pour discrétiser l'injecteur et la zone proche de sa sortie. Le raffinement du maillage dans les canaux des vrilles internes et externes ainsi que dans les trous de bol est porté à 10 cellules dans la hauteur afin d'assurer une bonne résolution de l'écoulement. Une résolution importante est aussi utilisée dans la zone d'injection du liquide (≈ 40 cellules dans le diamètre du nez de l'injecteur) jusqu'à la sortie du module d'injection. Comme le montre la Figure 3.47, le maillage est ensuite déraffiné progressivement dans le plénum jusqu'à la sortie du domaine. Ce maillage est typique de ceux utilisés pour des calculs réactifs d'injecteurs industriels assurant un bon compromis entre une résolution correcte de la dynamique de l'écoulement dans l'injecteur et un coût de calcul maîtrisé.

3.7.3 Paramètres numériques

La phase gazeuse est simulée à l'aide du solveur LES explicite AVBP. Les flux convectifs sont résolus à l'aide du schéma volume fini de Lax-Wendroff (Lax & Wendroff 1960), d'ordre deux en espace et en temps tandis que les flux diffusifs sont discrétisés par un opérateur 2Δ (Lamarque 2007). La stabilité du calcul est assurée via un opérateur de viscosité artificielle basé sur le senseur de Colin (Colin 2000). La turbulence non-résolue est prise en compte à l'aide du modèle de sous-maille SIGMA (Nicoud et al. 2011) qui offre un meilleur comportement que le modèle de Smagorinsky dans les écoulements rotationnels et cisailés. Les paramètres numériques relatifs à la phase gazeuse sont résumés dans le Tableau 3.48. Les conditions aux limites d'entrées (co-courant et admission d'air dans les vrilles) et de sortie du domaine sont imposés à l'aide de la méthode des caractéristiques NSCBC proposée par Poinot & Lele (1992). L'unité de longueur pariétale y^+ obtenue sur le maillage présenté dans la section 3.7.2, est de

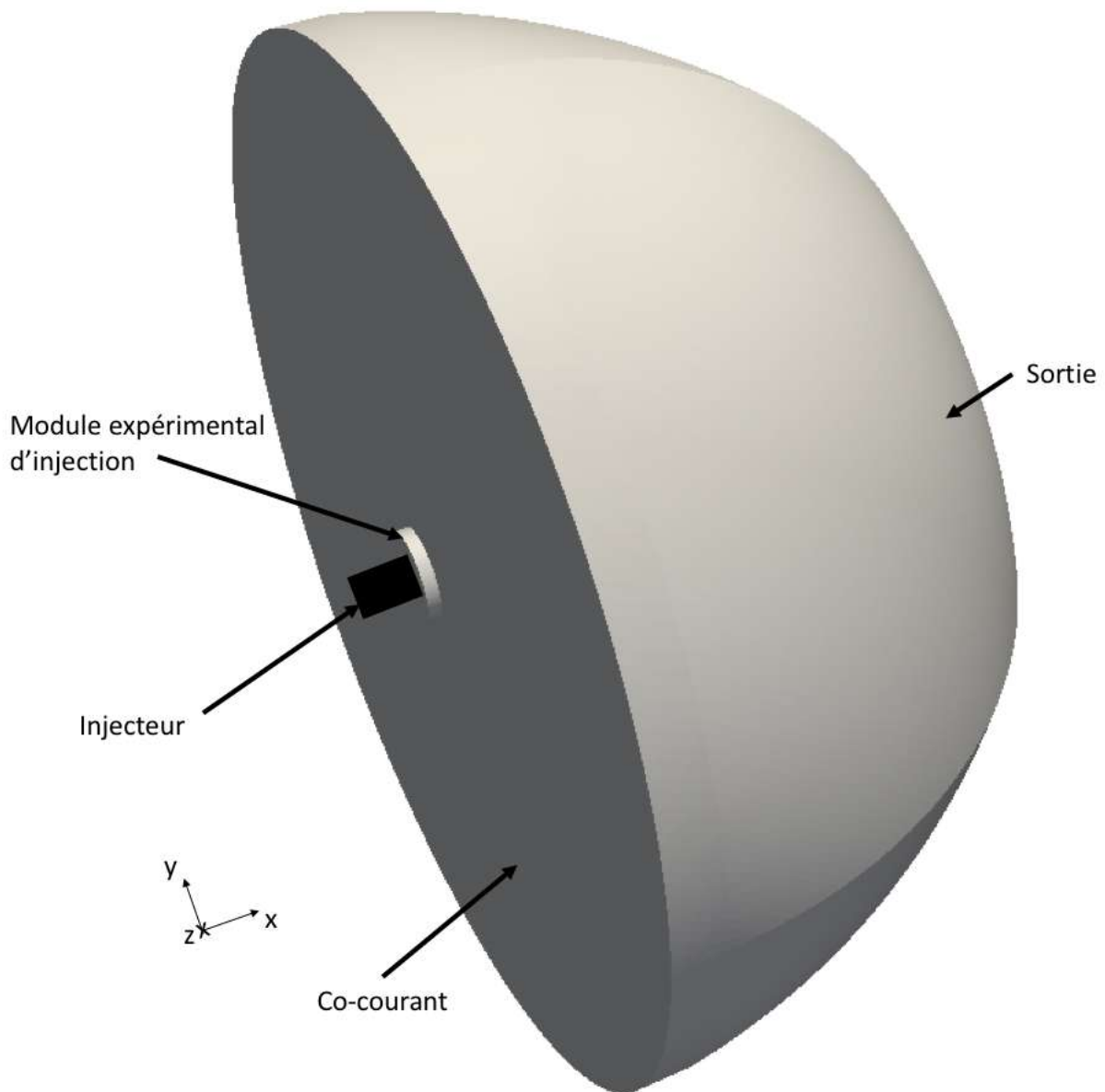


FIGURE 3.46 – Visualisation du domaine de simulation et des conditions aux limites utilisés pour caractériser l'injecteur aéronautique du type Airblast avec préfilmeur.

l'ordre de 40 dans les canaux et les trous de bol et de 100 dans la zone de film ce qui permet l'usage d'une loi de type "loglaw" pour modéliser le comportement en proche paroi.

La phase liquide est traitée par une approche Lagrangienne. La traînée des gouttes est modélisée par la corrélation empirique de Schiller and Naumann explicitée dans la partie 3.3. Le calcul étant réalisé à pression atmosphérique ($P = 1 \text{ atm}$) et température ambiante ($T = 25^\circ\text{C}$), les phénomènes d'évaporation de gouttes sont supposés négligeables et ne sont donc pas pris en compte. De ce fait, l'écoulement gazeux est uniquement affecté par la retro-action de la force de traînée créée par le déplacement des gouttes. La formation d'un film liquide en paroi est possible le long de la zone appelée "filming zone" sur la Figure 3.43. Son écoulement est modélisé via le modèle de O' Rourke & Amsden (2000) présenté en section 3.5. L'atomisation

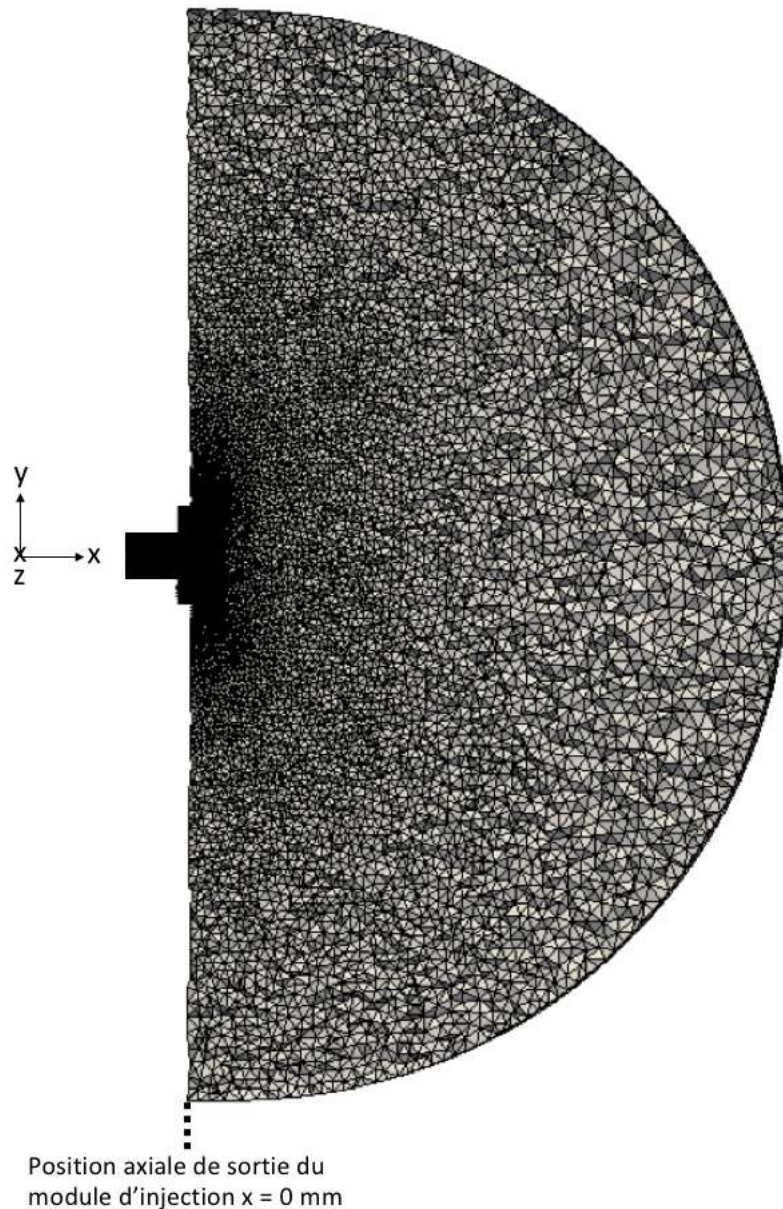


FIGURE 3.47 – Maillage du domaine de simulation du cas d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.

primaire du film liquide au niveau de bord d'atomisation ("atomizing edge" sur la Figure 3.43) est déterminée par le modèle Automatic-PAMELA développé dans la partie 3.6.2. Enfin, le modèle FAST (Senoner 2010) est utilisé pour simuler l'atomisation secondaire des gouttes du spray en sortie d'injecteur. Ce modèle est décrit dans la partie suivante avant la présentation des résultats du calcul. Le Tableau 3.49 résume les modèles Lagrangiens utilisés pour la simulation numérique.

Schéma de convection	Lax-Wendroff
Opérateur de diffusion	2Δ
Modèle de sous-maillages	SIGMA
Conditions aux limites	NSCBC
modèle de viscosité artificielle	Senseur de Colin
Coefficient d'ordre 2	0.05
Coefficient d'ordre 4	0.005

FIGURE 3.48 – Paramètres numériques utilisés pour les simulations de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.

Force de traînée	Schiller & Naumann (1935)
Evaporation	Non
Film liquide	O' Rourke & Amsden (2000)
Atomisation primaire	Automatic-PAMELA
Atomisation secondaire	FAST (Senoner 2010)

FIGURE 3.49 – Modèles Lagrangiens utilisés pour les simulations de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.

3.7.4 Présentation du modèle d'atomisation secondaire FAST

En raison du fort cisaillement gazeux qui s'exerce sur le spray, la prise en compte la fragmentation des gouttes, préalablement générées par l'atomisation primaire, est de première importance pour prédire la distribution de tailles de gouttes en sortie d'un injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Il existe de nombreux modèles pour prédire l'atomisation secondaire d'une goutte mais, historiquement, les deux modèles les plus populaires dans la littérature sont les modèles Wave/Kelvin-Helmholtz de Reitz (1987) et Taylor-Analogy Breakup (TAB) de O' Rourke & Amsden (1987). Le premier modèle a été dérivé à partir d'une analyse de stabilité linéaire en considérant un jet de liquide cylindrique stationnaire injecté dans un gaz incompressible et non-visqueux. Dans ces conditions, il est possible de relier la taille des gouttes créées par l'atomisation secondaire à la longueur d'onde la plus amplifiée d'une instabilité de Kelvin-Helmholtz. Le second modèle propose une approche basée sur l'analogie de Taylor (1963) qui assimile la déformation de la goutte à un système de ressort. L'atomisation secondaire de la goutte résulte alors d'une compétition entre les forces en présence. La tension de surface joue le rôle de force de rappel tandis que les forces extérieures, comme les forces aérodynamiques qui s'exercent sur la goutte, déstabilisent le système. La viscosité est également prise en compte et agit comme un amortisseur de la déformation. Lorsque la distortion de la goutte est trop importante, son atomisation secondaire est enclenchée et, le rayon des gouttes créées est calculé à partir d'une conservation de l'énergie. De nombreuses extensions et d'autres modèles existent dans la littérature et lecteur intéressé pourra, par exemple, se référer à l'article de revue de Raju (2006) qui en recense quelques uns.

Le modèle utilisé pour le calcul d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur a été implémenté et validé dans le code AVBP durant la thèse de Senoner (2010) sous le nom de FAST (Fast Atomization STochastic). Il est basé sur les travaux de Gorokhovski (2001),

Gorokhovski & Saveliev (2003) et a été initialement proposé par Apte et al. (2003). Il est fondé sur l'hypothèse de Kolmogorov (1941) selon laquelle le nombre de fragments générés par l'atomisation secondaire d'une goutte est indépendant de la taille de la goutte initiale. Suivant cette hypothèse et en considérant une fréquence d'atomisation f_{bu} constante, Kolmogorov (1941) a montré que la distribution de tailles des gouttes créées suit une loi log-normale. Cette hypothèse a par la suite été validée par Gorokhovski & Saveliev (2003) à partir d'observations expérimentales dans le cas d'un fort différentiel de vitesse entre les deux phases. Cette validation a ensuite permis aux auteurs d'établir un modèle.

L'atomisation ou non d'une goutte est basée sur un nombre de Weber We . En effet, une goutte est considérée comme instable si celui-ci dépasse une valeur critique We_{crit} .

$$We = \frac{\rho_g 2a_p |\vec{u}_g - \vec{u}_p|^2}{\sigma} > We_{crit} \quad (3.84)$$

où a_p est le rayon de la particule. Notons, que l'équation (3.84) peut être réécrite pour faire apparaître un rayon critique $r_{p,crit}$ que la goutte ne doit pas dépasser pour rester stable dans l'écoulement.

$$r_{p,crit} = \frac{We_{crit}\sigma}{2\rho_g |\vec{u}_g - \vec{u}_p|^2} \quad (3.85)$$

Le nombre de Weber critique dans les équations (3.84) et (3.85) est calculé à partir de la corrélation proposée par Pilch & Erdman (1987) :

$$We_{crit} = 12 \left(1 + 1.077 Oh^{1.6}\right) \quad (3.86)$$

où Oh est un nombre de Ohnsorge défini par :

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l 2a_p \sigma}} \quad (3.87)$$

Pour les écoulements turbulents, typiquement avec un nombre de Reynolds de l'écoulement gazeux autour de la goutte supérieur à 5000, Gorokhovski (2001) observe que l'expression (3.85) doit être modifiée pour prendre en compte le fait que l'intégralité du spectre de turbulence peut contribuer à la désintégration de la goutte. Il propose alors d'écrire le carré de la différence de vitesse entre la goutte et le gaz environnant en fonction du taux de dissipation de turbulence ϵ et du temps de relaxation τ_p de la goutte (eq. (3.5)) :

$$|\vec{u}_g - \vec{u}_p|^2 = \epsilon \tau_p \quad (3.88)$$

Pour les écoulements turbulents, le rayon critique $r_{p,crit}$ reformulé par Gorokhovski (2001) s'exprime alors :

$$r_{p,crit} = \left(\frac{9 We_{crit} \sigma \nu_{lam}}{\epsilon \rho_l} \right)^{1/3} \quad (3.89)$$

où ν_{lam} est la partie laminaire de la viscosité cinématique du gaz environnant.

Afin de tenir compte du fait qu'une goutte n'est pas atomisée par l'écoulement dès qu'elle devient instable, Gorokhovski (2001) introduit un temps d'atomisation t_{bu} qu'il associe au temps caractéristique d'une instabilité de Rayleigh-Taylor. Ce dernier s'écrit :

$$t_{bu}^{RT} = B \frac{a_p}{|\vec{u}_g - \vec{u}_p|} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3.90)$$

B est un coefficient qui vaut $\sqrt{3}$. Sa valeur est équivalente à celle proposée pour le modèle TAB par O' Rourke & Amsden (1987).

Lorsque la goutte de rayon a_p est instable et que son temps d'atomisation t_{bu} est atteint, elle se désintègre. Cet événement conduit à la formation de n_p gouttes, appelées gouttes filles, dont chacune est caractérisée par son rayon r_p tel que :

$$r_p = \alpha a_p \quad (3.91)$$

où α est un nombre compris entre $[0, 1]$. Gorokhovski & Saveliev (2003) ont alors montré que la densité de probabilité numérique de tailles de gouttes $f(r_p, t)$ prend la forme d'une loi log-normale qui s'exprime :

$$f(r_p, t) = \frac{1}{r_p} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle \ln^2 \alpha \rangle \nu t}} \exp \left[-\frac{(\ln(r_{p,0}/r_p) + \langle \ln \alpha \rangle \nu t)^2}{2\langle \ln^2 \alpha \rangle} \right] f_0(r_{p,0}) dr_{p,0} \quad (3.92)$$

où $\nu = f_{bu} n_p$ avec f_{bu} , la fréquence d'atomisation secondaire. $\langle \ln \alpha \rangle$ et $\langle \ln^2 \alpha \rangle$ correspondent aux moments d'ordre un et deux du spectre de désintégration. Ils sont considérés ici comme des paramètres du modèle. Le lecteur intéressé pourra se référer à l'article de Gorokhovski & Saveliev (2003) s'il souhaite plus de détails théoriques sur leur définition. $f_0(r_{p,0})$ correspond à la densité de probabilité numérique de tailles de gouttes initiale. Celle-ci est nulle pour tout rayon $r_{p,0}$ sauf lorsque $r_{p,0} = a_p$ et prend ainsi la forme d'une fonction Dirac δ :

$$f_0(r_{p,0}) = \delta(\ln(a_p - r_{p,0})) \quad (3.93)$$

Lorsque le temps t_{bu} est atteint, le terme νn_p vaut alors l'unité et des gouttes filles sont créées. Les rayons r_p des gouttes filles sont déterminés par des tirages aléatoires de valeurs de la distribution cumulative $T(r_p)$. Cette dernière est reliée à la densité de probabilité $f(r_p, t)$ (eq. (3.92)) par la relation suivante :

$$T(r_p) = \int_{-\infty}^{r_p} f(r_p) dr_p \quad (3.94)$$

$$\iff T(r_p) = \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{\ln(r_p) - \ln(a_p) + \langle \ln \alpha \rangle}{\sqrt{2\langle \ln^2 \alpha \rangle}} \right) \right] \quad (3.95)$$

Les deux moments $\langle \ln \alpha \rangle$ et $\langle \ln^2 \alpha \rangle$ sont modélisés par les expressions proposées par Apte et al. (2003) :

$$\langle \ln \alpha \rangle = k_1 \ln \left(\frac{We_{crit}}{We} \right) \quad (3.96)$$

$$-\frac{\langle \ln \alpha \rangle}{\langle \ln^2 \alpha \rangle} = k_2 \ln \left(\frac{r_{p,0}}{r_{p,crit}} \right) \quad (3.97)$$

où k_1 et k_2 sont des constantes libres du modèle. La constante k_1 contrôle la valeur moyenne de la distribution de tailles utilisée pour générer les gouttes filles, tandis que, k_2 a un impact sur l'étalement de la distribution. Les valeurs utilisées dans cette thèse correspondent à celles établies lors de la calibration du modèle par Senoner (2010) : $k_1 = 0.1$ et $k_2 = 0.8$.

Dans le but de reproduire la dynamique des gouttes filles issues de l'atomisation secondaire d'une goutte mère, ces dernières sont injectées avec un vecteur vitesse composé de la somme

de deux contributions : la vitesse de la goutte mère ainsi qu'une vitesse \vec{u}_p^{bu} dont la norme est définie par :

$$|\vec{u}_p^{bu}| = \frac{a_p}{t_{bu}} \quad (3.98)$$

La vitesse \vec{u}_p^{bu} est ajoutée pour prendre en compte l'accélération du liquide engendrée sous l'effet des forces aérodynamiques lors de l'atomisation secondaire de la goutte mère. Ses composantes sont choisies aléatoirement dans un plan normal à celui défini par le vecteur de la vitesse relative entre la goutte mère et le liquide $\vec{u}_{rel} = (\vec{u}_g - \vec{u}_p)$.

3.7.5 Déroutement des calculs et caractérisation de l'écoulement gazeux

Comme pour les simulations de la configuration de Gepperth et al. (2012), les calculs sont réalisés selon deux étapes. Tout d'abord, l'écoulement gazeux est établi et convergé sans la présence de la phase liquide. Puis, le processus d'injection est entamé. Les particules Lagrangiennes sont alors injectées sous la forme d'un film liquide qui s'écoule jusqu'au bord d'atomisation avant de subir une atomisation primaire puis secondaire.

Convergence de l'écoulement gazeux

L'établissement du calcul est contrôlé en se basant sur le temps de passage de l'écoulement gazeux dans le domaine. Ce temps de passage est déterminé à partir de la vitesse moyenne de l'écoulement gazeux en entrée du domaine et en considérant une trajectoire en ligne droite. Il est donné dans le Tableau 3.50 pour le point de fonctionnement gazeux choisi pour l'étude. Le temps de passage de l'écoulement gazeux à travers l'injecteur y est également fourni à titre indicatif.

Temps de passage dans le domaine [ms]	150
Temps de passage dans l'injecteur [ms]	6.5

FIGURE 3.50 – Temps de passage de l'écoulement gazeux à travers le domaine de simulation, d'une part, et l'injecteur, d'autre part, pour le point de fonctionnement considéré pour la simulation numérique d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.

L'écoulement gazeux est établi pendant un temps physiques correspondant à 8 temps de passage dans le domaine, soit environ 100 temps de passage dans l'injecteur. La courbe d'évolution de l'énergie cinétique dans le domaine en Figure 3.51 montre que ce nombre de temps de passage permet de converger l'écoulement dans le domaine.

Structure de l'écoulement gazeux

La Figure 3.52 présente des coupes en $Z = 0$, censurée et déformée, coloriées par les composantes axiale et tangentielle de la vitesse moyenne de l'écoulement gazeux en sortie d'injecteur. Elle permet d'observer la formation de zones de recirculation, matérialisées dans la Figure 3.52a par la ligne d'isocontour de vitesse axiale $U_{ax} = 0 \text{ m.s}^{-1}$ en blanc. La première recirculation, appelée Outer Recirculation Zone (ORZ), est causée par l'ouverture soudaine du jet dans le

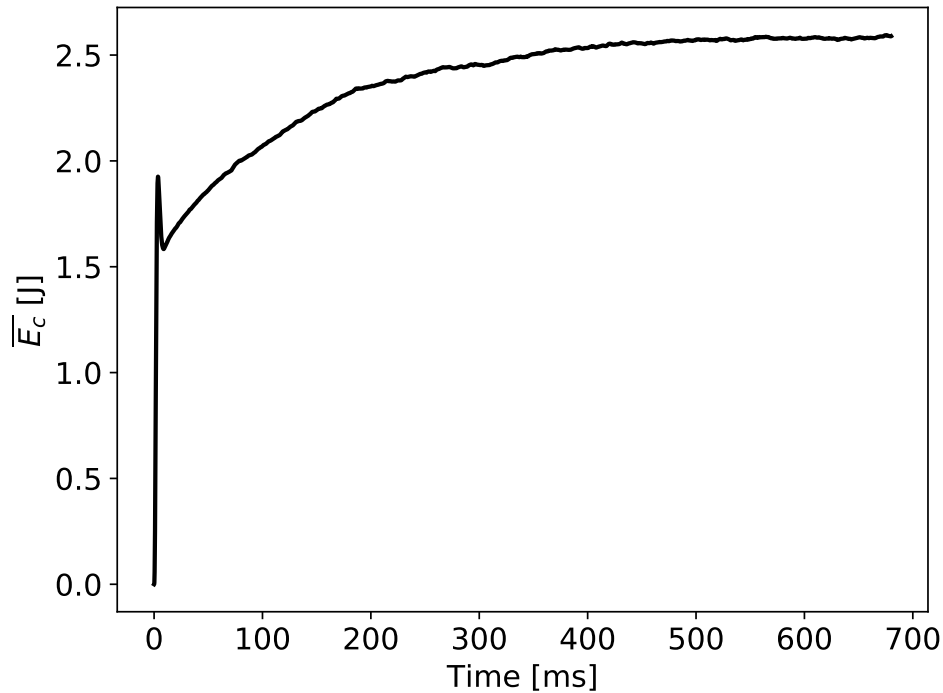
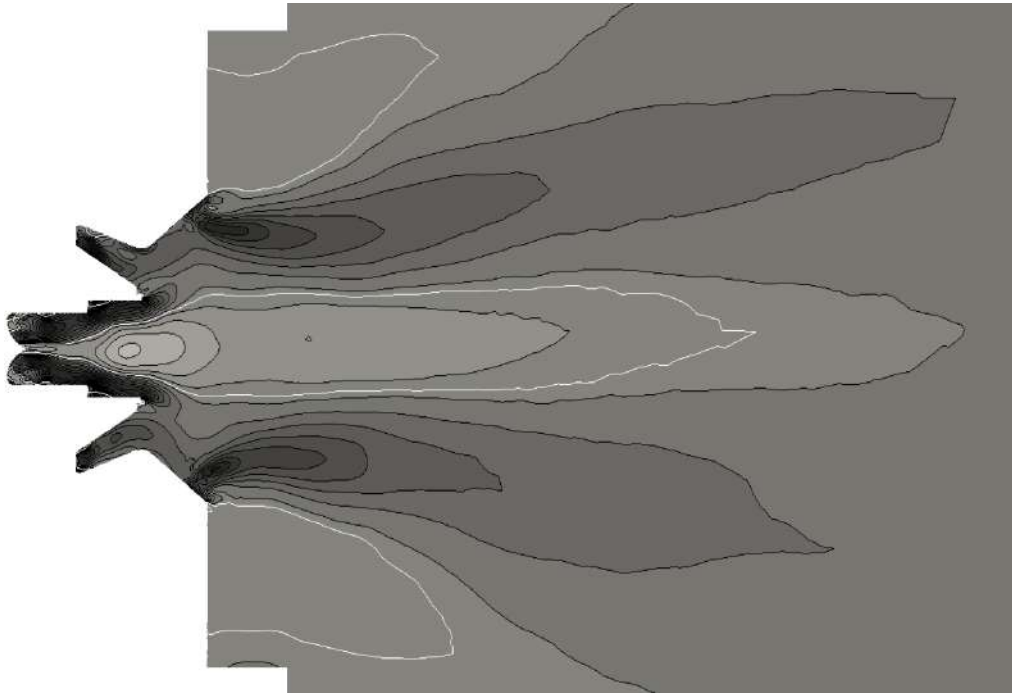
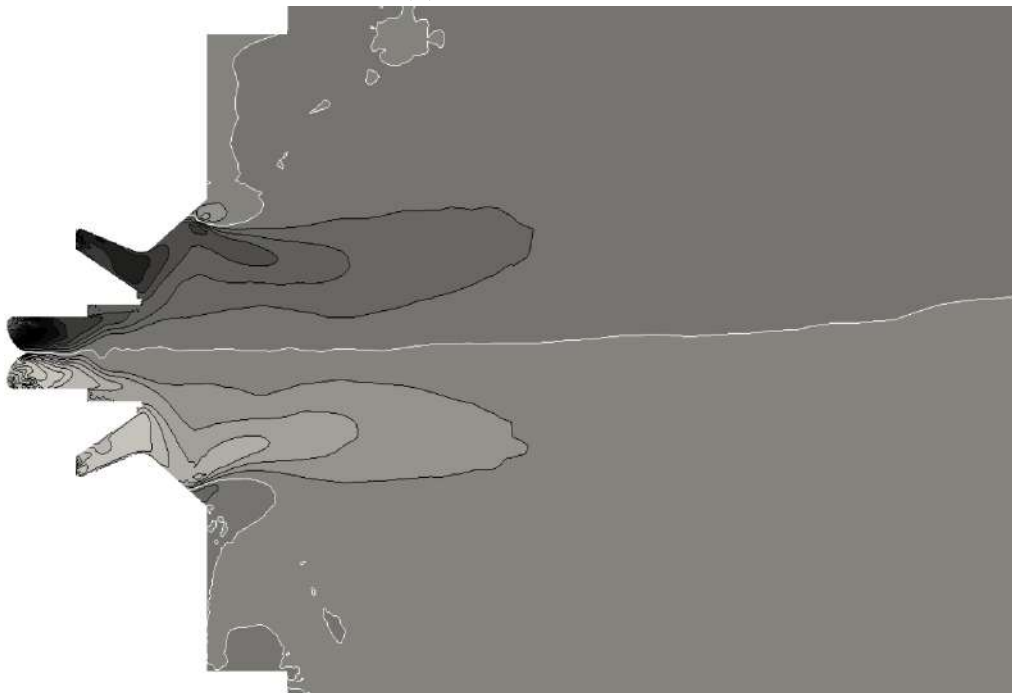


FIGURE 3.51 – Evolution de l'énergie cinétique \bar{E}_c dans le domaine obtenue à partir du calcul purement gazeux du points de fonctionnement à 4% PdC de la configuration d'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur.

plénum. Son impact sur l'écoulement est cependant limité par la présence des trous de bol qui redressent l'écoulement en sortie améliorant la dynamique de la flamme dans les cas réactifs et évitant notamment que des gouttes du spray soient piégées dans la ORZ. La seconde recirculation, appelée Inner Recirculation Zone (IRZ), est située au centre de l'écoulement et s'étend sur une large zone remontant jusqu'au coeur de l'injecteur. Elle est créée par la rotation importante de l'écoulement dans l'injecteur. Ce mouvement engendre un gradient de pression négatif qui conduit à l'inversion de la vitesse axiale au centre. Cette zone a un fort impact sur la formation du spray puisqu'elle diminue la section de passage de l'écoulement dans l'injecteur ce qui a pour conséquence d'accélérer fortement sa vitesse axiale au niveau de la zone de film liquide et du bord d'atomisation (voir Figure 3.43 "filming zone" et "atomizing edge"). Le cisaillement du liquide est alors très important ce qui facilite son atomisation en fines gouttes.



(a) Vitesse axiale



(b) Vitesse tangentielle

FIGURE 3.52 – Coupe en $Z = 0$, censurée et déformée, de l'écoulement gazeux en sortie d'injecteur pour le point de fonctionnement à 4% PdC. L'écoulement est colorié par sa vitesse moyenne (a) axiale ou (b) tangentielle. La vitesse axiale est définie comme la composante de la vitesse selon l'axe X tandis que la vitesse tangentielle correspond à la composante selon l'axe Z . Les lignes représentent des isocontours de vitesse. La vitesse est nulle le long de la ligne blanche.

3.7.6 Résultats du calcul diphasique

La simulation est réalisée sur un temps physique de 456 ms allant du début de l'injection de liquide jusqu'à l'obtention d'une convergence statistique raisonnable des caractéristiques du spray dans les plans de mesure. Le coût du calcul est d'environ 58 000 heures sur les processeurs CPU Intel Haswell du supercalculateur NEMO (CERFACS). Il convient de souligner le faible coût de calcul de ce type d'approche en comparaison aux calculs hautes fidélités réalisés dans le chapitre précédent. Dans la suite, la structure du spray prédit est tout d'abord discutée, puis, ses caractéristiques sont comparées aux résultats expérimentaux.

Structure du spray

La Figure 3.53 présente une visualisation instantanée du spray dans un plan $Z = 0$. Les gouttes sont colorées en fonction de leurs diamètres et leurs tailles sont grossies en fonction de ceux-ci afin de faciliter la visualisation. Il est intéressant d'observer que le spray créé a une forme de V. Cette structure résulte de la forte mise en rotation de l'écoulement gazeux par les vrilles du système d'injection. Cette dernière entraîne les gouttes atomisées au niveau du bord d'atomisation dans un mouvement de circonvolution à l'origine de l'apparition d'une vitesse radiale. Les gouttes sont alors expulsées en aval de l'injecteur selon une trajectoire qui tend à les écarter de son axe central. L'ouverture du spray est alors guidée par la dynamique de l'écoulement gazeux, et en particulier limitée par les trous de bol. Proche de l'injecteur, la forte vitesse du spray empêche les gouttes d'être entraînées dans la zone de recirculation centrale (IRZ). Cependant, lorsque celle-ci faiblit, certaines gouttes de faibles diamètres, et donc très influencées par l'écoulement gazeux, se retrouvent entraînées dans cette IRZ. Leurs vitesses diminuent alors drastiquement dans la direction axiale et, leurs composantes radiales s'inversent les faisant revenir vers l'axe central de l'injecteur. Ce comportement est particulièrement visible en aval du plan P3. Il faut toutefois noter qu'en présence d'une flamme, ces petites gouttes se seraient très certainement déjà évaporées à cette distance. Cette dynamique n'existe donc probablement que dans l'écoulement à froid.

L'effet des modèles sur la taille des gouttes est maintenant discuté. Comme le montre la Figure 3.53, les gouttes sont directement injectées le long de la paroi du préfilmeur de l'injecteur. Notons que, n'ayant pas d'impact ni sur la dynamique du film, ni sur la distribution de tailles de gouttes prédite par le modèle Automatic-PAMELA, leur diamètre a été fixé arbitrairement. Les gouttes s'écoulent ensuite jusqu'à la lèvre d'atomisation avec une vitesse égale à celle d'un film liquide de volume équivalent donnée par le modèle de film. Puis, elles sont atomisées par le modèle Automatic-PAMELA. Comme observé dans la Figure 3.53, le modèle produit une large gamme de tailles de gouttes en aval de la lèvre d'atomisation. Ce comportement est qualitativement représentatif de la physique, où le spray issu de l'atomisation primaire est généré à la fois par la désintégration de sacs de liquide en de très petites gouttes ("bag breakup") et, par la fragmentation d'un vaste éventail de tailles de ligaments menant à des gouttes de diamètres très différents. L'influence du modèle d'atomisation secondaire FAST est ensuite bien visible en aval du préfilmeur. En effet, sous l'influence du fort cisaillement aérodynamique en aval du préfilmeur, les gouttes nouvellement formées par le modèle Automatic-PAMELA sont très rapidement fragmentées par le modèle, puis leurs tailles semblent diminuer continuellement au fur et à mesure de leurs éloignement dans le plénum. Tandis que leurs diamètres évoluent sensiblement entre l'injection au niveau de la lèvre et la sortie du bol de l'injecteur, ils semblent diminuer beaucoup plus lentement à partir du plan P1.

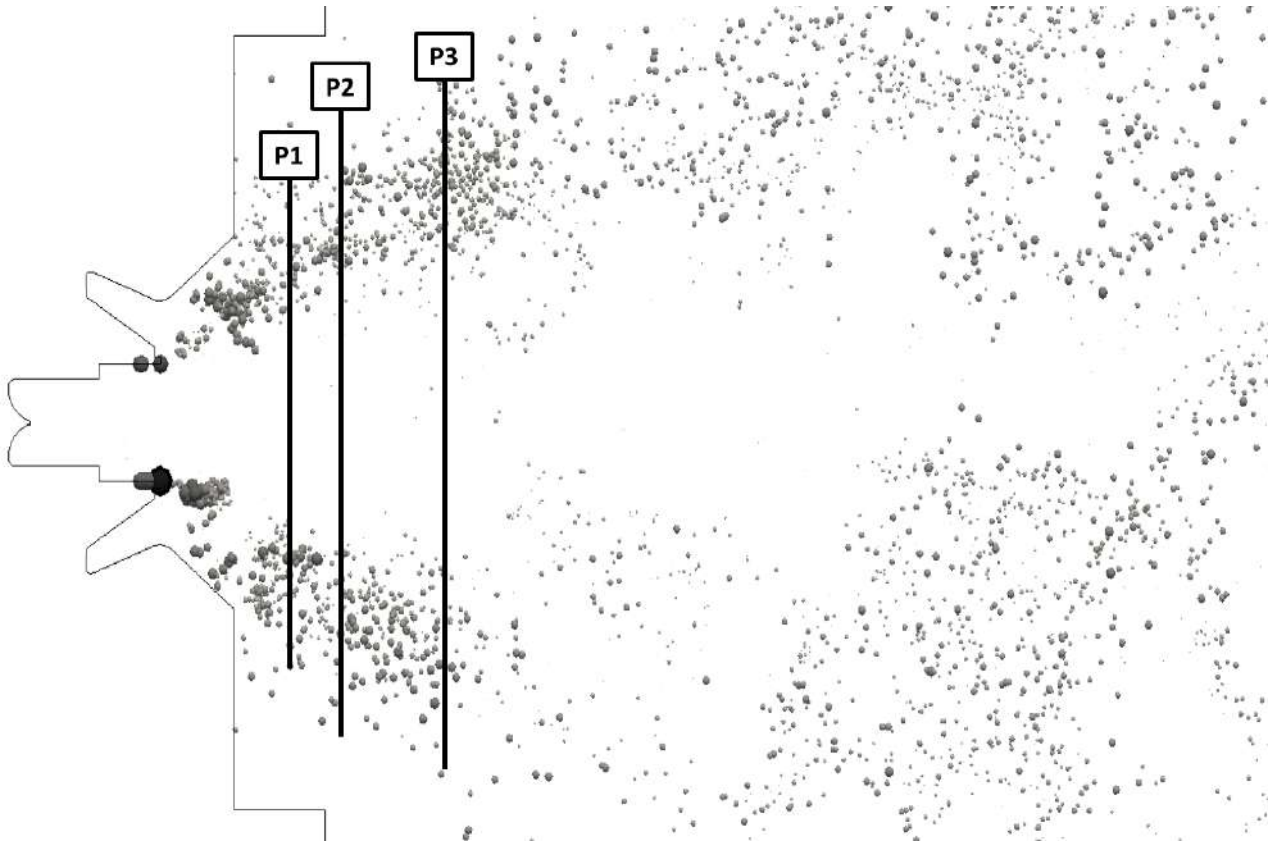


FIGURE 3.53 – Visualisation instantanée, censurée et déformée, du spray généré par l'injecteur industriel de type Airblast avec préfilmeur. La diamètre des gouttes est multiplié par un facteur 20.

Comparaison des caractéristiques du spray avec les expériences

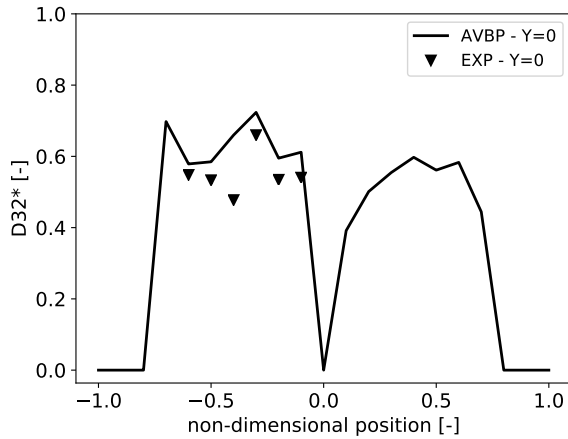
Les caractéristiques du spray sont maintenant analysées et comparées à des données issues d'une analyse par PDPA. Comme expliqué dans la partie 3.7.1, les mesures expérimentales sont réparties selon les plans P1, P2 et P3 et ont été réalisées le long de la droite $Z = 0$, d'une part, et $Y = 0$, d'autre part. Afin de reproduire le plus fidèlement possible ce type d'analyse, les caractéristiques des gouttes sont enregistrées tout au long du calcul lors de leurs passages à travers les différents plans de mesures. Le diamètre moyen de Sauter ainsi que les vitesses moyennes axiales et radiales sont ensuite déterminés pour chaque point de mesure en considérant les gouttes ayant franchies le plan dans un carré de $500 \mu\text{m}$ de côté centré sur un point de mesure. Il peut être noté que le domaine de mesure formé par l'intersection des deux lasers lors d'une analyse PDPA a une taille plus petite. Cependant, le temps physique de mesure dans la simulation étant bien inférieur à celui des expériences, la taille du domaine de mesure doit être augmentée pour obtenir une convergence statistique satisfaisante des résultats.

L'évolution du diamètre de Sauter adimensionnalisé D_{32}^* selon les droites $Z = 0$ et $Y = 0$ est donnée pour les différents plans en Figure 3.54. L'adimensionnalisation, réalisée pour des raisons de confidentialité, est obtenue en divisant le diamètre de Sauter par une valeur arbitraire. Cette valeur est la même pour les trois graphiques. Il apparaît que la simulation est capable de reproduire fidèlement la répartition de ce diamètre dans le spray. Comme dans les expériences, les plus grands diamètres se situe sur les bords du spray. Leur taille diminue ensuite en se

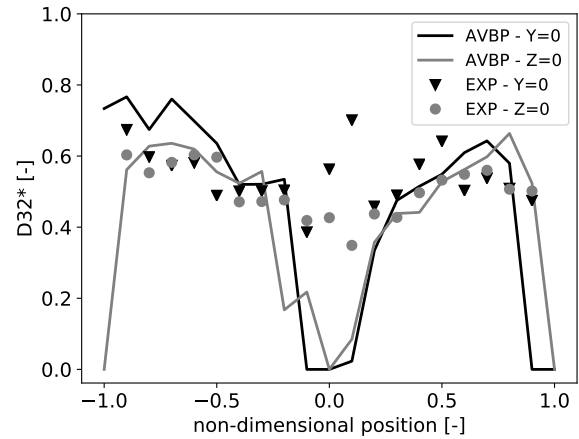
rapprochant du centre. Il faut ici noter l'écart important entre les mesures expérimentales et numériques dans la zone d'activité de la recirculation interne (IRZ) au centre du spray. Comme observé dans la partie précédente, la forte rotation de l'écoulement gazeux donne une vitesse radiale aux gouttes du spray qui tend à les pousser en dehors de cette zone. La quantité de gouttes qui passent dans cette zone est donc très faible particulièrement dans les plans P1 et P2 qui sont tout proches de la sortie de l'injecteur. La convergence statistique n'est donc pas atteinte dans la simulation et les données dans cette zone ne sont pas représentatives. Notons que, malgré un temps de mesure largement supérieur à celui de la simulation, l'oscillation importante des valeurs dans cette zone révèle que les mesures expérimentales y ont également un faible niveau de convergence.

La Figure 3.55 permet d'observer l'évolution des vitesses axiales U_{ax}^* et radiales U_r^* des gouttes le long des droites $Z = 0$ et $Y = 0$. Ces dernières sont toutes adimensionnalisées par la même valeur arbitraire. Tout d'abord, la vitesse axiale des gouttes dans le spray est bien décrite par la simulation. En effet, malgré une légère sur-estimation de la vitesse axiale dans la zone $[-1.0, -0.4]$, la position du pic ainsi que la norme de la vitesse obtenues sont en bon accord avec les relevés expérimentaux. Il convient en particulier de remarquer que les dynamiques d'accélération de la vitesse axiale des gouttes entre les plans P1 et P2 et de stabilisation entre les plans P2 et P3 sont correctement reproduites par la simulation. La zone de recirculation est également bien représentée avec des vitesses axiales proches de zero au centre de l'écoulement. La légère sur-estimation de la vitesses axiales notées précédemment est attribuée à la difficulté d'obtenir un échantillon localement représentatif du spray tout en gardant un temps de simulation raisonnable. Le temps de simulation étant bien inférieur au temps de mesure dans les expériences, la convergence des résultats est donc de fait moins aboutie dans la simulation ce qui peut engendrer des écarts. Ces écarts sont particulièrement visibles sur les courbes d'évolution de la vitesse radiale des gouttes. La grande disparité des vitesses radiales observées localement dans un carré de mesure rend la convergence de cette grandeur particulièrement difficile à atteindre. Toutefois, il est intéressant d'observer que l'inversion de la vitesse radiale au centre de l'écoulement est bien reproduite. De plus, malgré des oscillations résiduelles (particulièrement visibles au plan P2), les valeurs semblent globalement en bon accord avec les expériences.

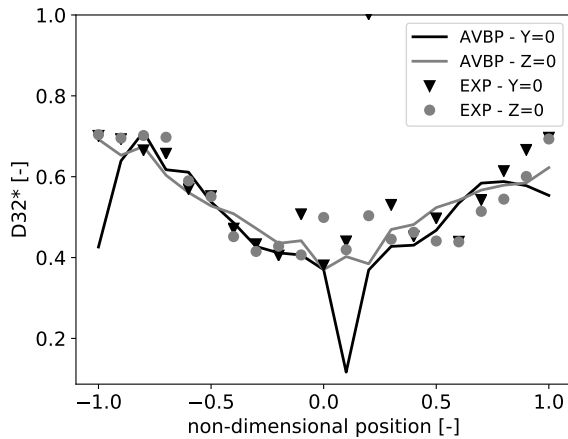
Les modèles phénoménologiques utilisés dans la simulation ont donc bien permis de reproduire la taille caractéristique D_{32} des gouttes dans le spray ainsi que leurs dynamiques dans l'écoulement.



(a) Plan P1

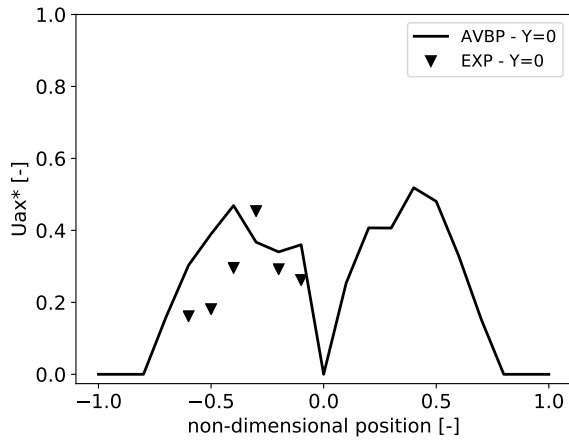


(b) Plan P2

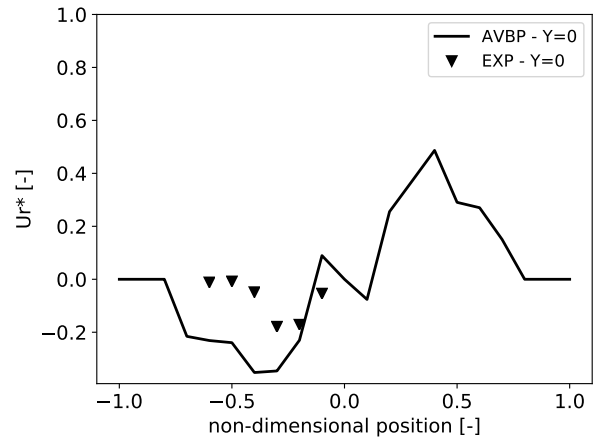


(c) Plan P3

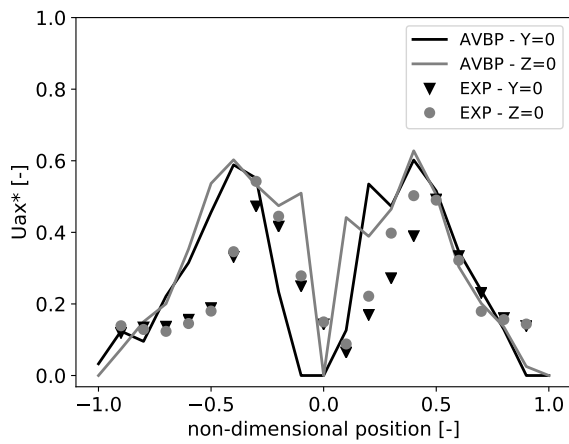
FIGURE 3.54 – Evolutions du diamètre de Sauter adimensionnalisé D_{32}^* dans les plans P1, P2 et P3 selon les droites $Y = 0$ et $Z = 0$ obtenues pour le point de fonctionnement considéré de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Le diamètre de Sauter est adimensionnalisé par une valeur arbitraire commune aux différentes courbes. Les résultats de simulation sont représentés par les lignes tandis que ceux issus des expériences sont matérialisés par des points.



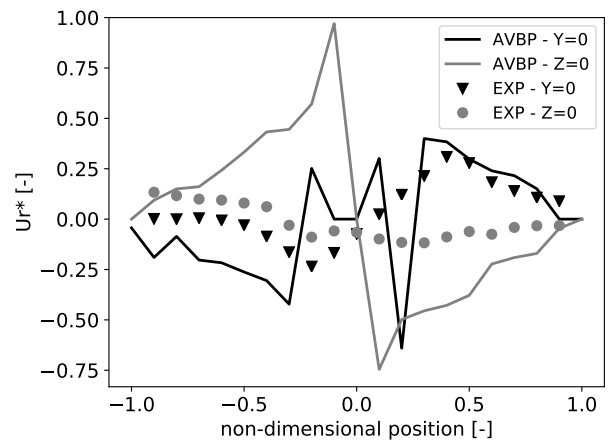
(a) Plan P1 : Vitesse axiale



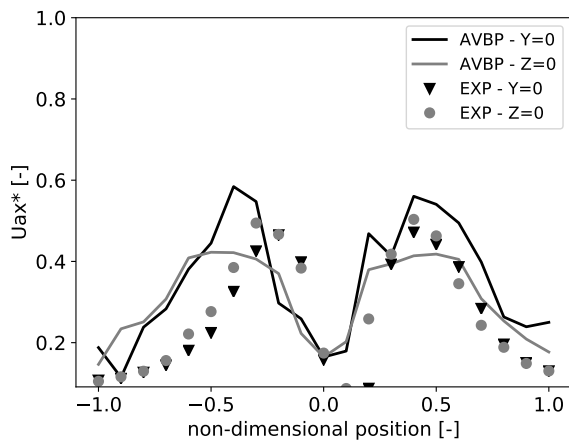
(b) Plan P1 : Vitesse radiale



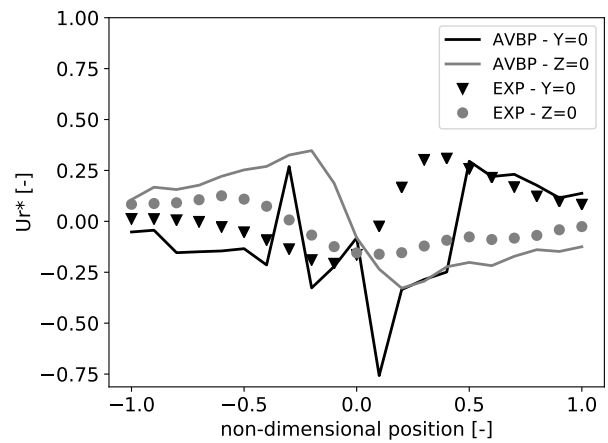
(c) Plan P2 : Vitesse axiale



(d) Plan P2 : Vitesse radiale



(e) Plan P3 : Vitesse axiale



(f) Plan P3 : Vitesse radiale

FIGURE 3.55 – Evolutions des vitesses adimensionnalisées axiales U_{ax}^* (selon l'axe X) et radiales U_r^* des gouttes dans les plans P1, P2 et P3 selon les droites $Y = 0$ et $Z = 0$ obtenues pour le point de fonctionnement considéré de l'injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Les vitesses sont adimensionnalisées par une valeur arbitraire commune aux différentes courbes. Les résultats de simulation sont représentés par les lignes tandis que ceux issus des expériences sont matérialisés par des points.

3.8 Conclusion du chapitre

Face au coût élevé des simulations numériques directes réalisées dans le chapitre 2, les travaux présentés ici ont consisté à développer une démarche moins couteuse pour prédire la dynamique et l'atomisation du liquide dans des configurations industrielles d'injecteur de type Airblast avec préfilmeur. L'approche proposée se base sur un ensemble de modèles phénoménologiques. Ces modèles, implémentés dans le contexte d'une description Lagrangienne de la phase liquide, permettent de décrire simplement des phénomènes tels que la traînée des gouttes du spray, leur rétro-action sur la phase gazeuse, l'écoulement du film liquide ou encore l'atomisation primaire au niveau de la lèvre du préfilmeur. Une part importante des travaux se sont en particulier concentrés sur la modélisation de ce dernier phénomène. Ainsi, différents modèles d'atomisation primaire disponibles dans la littérature ont, tout d'abord, été discutés, puis, le développement, la calibration et la validation d'un modèle, appelé Automatic-PAMELA, ont été détaillés. Ce dernier reprend les principales hypothèses et corrélations du modèle PAMELA proposé par Chaussonnet et al. (2013), Chaussonnet (2014), Chaussonnet et al. (2016). Il s'en démarque, toutefois, par l'expression locale et la détermination automatique de toutes des grandeurs d'entrée ce qui permet son utilisation dans des configurations complexes comme celles des injecteurs aéronautiques. Une analyse de la sensibilité de la distribution de tailles de gouttes données par le modèle en fonction des paramètres d'entrée a par la suite été conduite. Elle a montré que la vitesse locale de l'écoulement gazeux est le principal paramètre qui influence la distribution de tailles de gouttes. Cette observation est en accord avec les conclusions de nombreuses études expérimentales, parmi lesquelles Lefebvre (1980), Jasuja (1981), Sattelmayer & Wittig (1986), Aigner & Wittig (1988), Beck et al. (1991), Bhayaraju & Hassa (2009), ce qui valide le comportement global des corrélations du modèle. La méthodologie a finalement été couplée avec un modèle d'atomisation secondaire, appelé FAST, avant d'être appliquée à la simulation d'un injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Les caractéristiques du spray ont ensuite été comparées avec des mesures expérimentales issues d'une analyse PDPA. Cette comparaison a montré une bonne prédiction de la taille caractéristique des gouttes et de leurs dynamiques dans le spray.

L'approche phénoménologique développée dans ce chapitre permet donc de prédire les caractéristiques du spray issu d'un injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur pour un coût de calcul réduit. Les modèles développés sont, cependant, sujet à certaines hypothèses, concernant notamment la configuration de l'écoulement. Le modèle d'écoulement de film se limite, par exemple, aux films liquides minces. Le modèle d'atomisation primaire Automatic-PAMELA se cantonne, quant à lui, à décrire des configurations d'écoulement similaires au cas de Gepperth et al. (2012). Ces configurations doivent, en particulier, posséder une épaisseur de lèvre du préfilmeur de l'ordre de quelques millimètres puisque, comme nous l'avons étudié dans le chapitre 2, le processus d'atomisation primaire n'est plus le même dans le cas d'une configuration en forme de marche.

Même si l'approche phénoménologique constitue un outil très utile pour prédire les caractéristiques d'un spray d'injecteur aéronautique en fonction des paramètres de l'écoulement, elle nécessite une bonne connaissance a priori des phénomènes physiques en jeu. Son utilisation est de fait limitée à des géométries et des configurations d'écoulement connues. Il apparaît donc souhaitable de posséder en parallèle une méthode plus générique capable de résoudre l'écoulement de la phase liquide dans l'injecteur sans connaissance préalable de sa topologie. Cette méthode permettrait ainsi de traiter des cas où la phénoménologie amenant à la formation du

spray est mal connue et, par exemple, de dériver par la suite des modèles phénoménologiques adaptés. Le prochain chapitre expose donc les développements réalisés pour doter le code AVBP d'une méthode multifluides aux interfaces diffuses.

Chapitre 4

Simulation numérique des écoulements diphasiques avec une approche aux interfaces diffuses

4.1 Introduction

Bien que très utile pour prédire les caractéristiques globales d'un spray pour un coût de calcul très faible, les modèles phénoménologiques ne sont capables de décrire qu'une gamme restreinte de topologies d'écoulement. Cette limitation est problématique pour l'étude de configurations où la phénoménologie de l'atomisation n'est pas très bien connue et où il n'existe pas de modèle dans la littérature. Dans l'optique de pallier cette difficulté, il apparaît alors intéressant de disposer en parallèle d'une méthodologie plus générique capable de traiter tous les types d'écoulements diphasiques. Ce chapitre expose donc le développement d'une méthode multifluides aux interfaces diffuses dans le solveur AVBP. Choisie pour sa bonne intégration au formalisme compressible et multiespèces du code, la méthode multifluides propose de décrire l'interface entre le gaz et le liquide comme une région hétérogène d'épaisseur finie où les deux phases coexistent. Les variables de l'écoulement évoluent rapidement à travers cette région mais de façon continue. L'approche multifluides résulte d'une combinaison de trois éléments. Le premier est un système d'équations capable de décrire la dynamique d'un écoulement multiphasique. Les principaux modèles et le système d'équations utilisé sont détaillés dans la partie 4.2. Le second élément est l'utilisation d'une fermeture thermodynamique capable de décrire le comportement des espèces en phase gazeuse comme en phase liquide. Différents modèles existants sont, tout d'abord, discutés dans la partie 4.3, puis, les principales relations thermodynamiques liées à la fermeture choisie sont détaillées dans un contexte monocomposant et multicomposants. La dérivation des coefficients thermodynamiques spécifiques à la fermeture utilisée est ensuite explicitée permettant d'introduire une méthode de modification de la vitesse du son pour augmenter le pas de temps dans les simulations. Le troisième élément est l'emploi d'un schéma numérique capable de conserver les forts gradients présents dans la zone d'interface, et notamment celui de masse volumique, au cours du temps tout en assurant une bonne stabilité numérique. Un schéma numérique de Godunov (1959) est souvent employé dans la littérature pour satisfaire cette contrainte. Traditionnellement utilisé pour traiter des écoulements en présence de chocs, ce type de schéma est capable de transporter un profil très raide (pouvant aller jusqu'au créneau) dans l'écoulement sans compromettre la stabilité du calcul. La

partie 4.4 décrit ce schéma numérique et explicite les développements réalisés pour l'intégrer à la formulation non-structurée du code AVBP. Le nouveau solveur numérique est ensuite validé et caractérisé en l'absence de termes diffusifs sur des cas 1D et 2D dans la partie 4.5. L'ajout de ces termes ainsi que de la force de tension de surface est ensuite discuté dans les parties 4.6 et 4.7. Puis, la prise en compte de la force de tension de surface est validée par des cas tests 2D. Dans la partie 4.8, l'approche multifluides développée est finalement testée sur des cas de film liquide cisailé et d'atomisation de nappe afin de démontrer le potentiel de la méthode pour simuler des phénomènes d'atomisation de type Airblast.

4.2 Système d'équations

La définition d'un système d'équations constitue une première étape essentielle pour la simulation des écoulements multiphasiques avec une approche aux interfaces diffuses. Le modèle à 7 équations dérivé par Baer & Nunziato (1986) offre sans doute la formulation la plus complète. Il fût initialement proposé pour traiter des transitions de la déflagration vers la détonation (DDT) dans des matériaux granulaires et constitue le premier modèle recensé dans la littérature. Ces travaux ont ensuite été étendus par Saurel & Abgrall (1999) pour la simulation de deux phases séparées par une méthode d'interface diffuse. Ce modèle permet de décrire un système composé de deux phases en déséquilibre puisque chacune d'elles est libre de posséder ses propres vitesses, pressions, températures et potentiels chimiques. Le modèle est donc constitué d'une équation de transport de masse, de quantité de mouvement et d'énergie pour chaque phase et d'une équation de transport de la fraction volumique d'une des deux phases. Cette dernière, appelée "compaction equation", permet de lier les deux phases entre elles en rendant compte de la variation locale du volume de chaque phase. Le système dérivé par Saurel & Abgrall (1999) à partir des travaux de Baer & Nunziato (1986) s'écrit :

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{u}_g) = \dot{m} \quad (4.1a)$$

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g \vec{u}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g (\rho_g \vec{u}_g \otimes \vec{u}_g + P_g \vec{I})) = P_i \nabla \alpha_g + \dot{m} \vec{u}_i + \vec{F}_d \quad (4.1b)$$

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g E_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g (\rho_g E_g + P_g) \vec{u}_g) = P_i \vec{u}_i \cdot \nabla \alpha_g + \dot{m} E_i + \vec{F}_d \vec{u}_i + Q_i \quad (4.1c)$$

$$\frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{u}_l) = -\dot{m} \quad (4.1d)$$

$$\frac{\partial \alpha_l \rho_l \vec{u}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l (\rho_l \vec{u}_l \otimes \vec{u}_l + P_l \vec{I})) = -P_i \nabla \alpha_g - \dot{m} \vec{u}_i - \vec{F}_d \quad (4.1e)$$

$$\frac{\partial \alpha_l \rho_l E_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l (\rho_l E_l + P_l) \vec{u}_l) = -P_i \vec{u}_i \cdot \nabla \alpha_g - \dot{m} E_i - \vec{F}_d \vec{u}_i - Q_i \quad (4.1f)$$

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \vec{v}_i \nabla \alpha_g = 0 \quad (4.1g)$$

Dans le système d'équations (4.1), les indices l et g font respectivement références aux phases liquide et gazeuse. ρ_k , \vec{u}_k et E_k , P_k et α_k sont respectivement la masse volumique, le vecteur vitesse, l'énergie totale, la pression et la fraction de volume locale de la phase $k = l$ ou g . P_i , \vec{u}_i , E_i et Q_i représentent respectivement la pression, le vecteur vitesse, l'énergie et le transfert convectif à l'interface. \dot{m} et \vec{F}_d sont le transfert de masse entre le liquide et le gaz dû au changement de phase et la contribution des forces de traînée.

Ce modèle est capable de décrire des écoulements où chaque phase a sa propre pression, température, vitesse et potentiel chimique. Il est de fait en mesure de rendre compte d'une large gamme de problèmes physiques dans lesquels les deux phases peuvent être en déséquilibre complet. Cependant, la généralité de cette formulation engendre des limitations pratiques. En particulier, la présence du gradient d'une quantité transportée ($\nabla\alpha_g$) dans la partie droite des équations peut conduire à un système non-hyperbolique selon les hypothèses retenues pour le calcul de la vitesse \vec{u}_i et de la pression P_i à l'interface. A titre d'exemple, Saurel & Abgrall (1999) ont montré que l'hypothèse d'un liquide incompressible, et donc d'une pression d'interface égale à la pression de la phase gazeuse $P_i = P_g$, engendre un système non-hyperbolique. Plusieurs solutions ont été proposées pour traiter ces termes de pression et de vitesse. Observant que le temps de relaxation de la vitesse et de la pression est négligeable devant le temps caractéristique de l'écoulement, Saurel & Abgrall (1999) proposent par exemple d'utiliser une méthode de "splitting" pour imposer une relaxation rapide des pressions et des vitesses à l'interface et converger vers $P_i = P_l = P_g$ et $u_i = u_l = u_g$. Cette méthode est valable en l'absence de choc ou de transfert de masse entre les phases au niveau des chocs. Afin de gérer numériquement un choc en présence d'une discontinuité de fraction de volume α_g (ou alternativement α_l), Abgrall & Saurel (2003) ont développé un schéma numérique volume fini qui simplifie l'évaluation des termes à l'interface en considérant directement leur intégrale sur un volume de contrôle.

4.2.1 Modèle à 5 équations

En faisant l'hypothèse d'un équilibre mécanique entre les deux phases, l'égalité des pressions et des vitesses locales qui en découle permet de réduire le modèle à 7 équations de Baer & Nunziato (1986) au modèle à 5 équation de Kapila et al. (2001). Le système d'équations (4.1) simplifié s'écrit alors :

$$\frac{\partial\alpha_g\rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g\rho_g\vec{u}) = 0 \quad (4.2a)$$

$$\frac{\partial\alpha_l\rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l\rho_l\vec{u}) = 0 \quad (4.2b)$$

$$\frac{\partial\rho\vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u} \otimes \vec{u} + P\vec{I}) = 0 \quad (4.2c)$$

$$\frac{\partial\rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P)\vec{u}) = 0 \quad (4.2d)$$

$$\frac{\partial\alpha_l}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla\alpha_l = \alpha_l(1 - \alpha_l) \frac{\rho_g c_g^2 - \rho_l c_l^2}{\rho_l c_l^2 \alpha_l^{-1} - \rho_g c_g^2 \alpha_g^{-1}} \nabla \cdot \vec{u} \quad (4.2e)$$

où ρ , \vec{u} et E et P sont respectivement la masse volumique, le vecteur vitesse, l'énergie totale et la pression du mélange liquide/gaz. α_l et α_g représentent la fraction volumique locale de liquide et de gaz dont la somme vaut un ($\alpha_l + \alpha_g = 1$). c_k est la vitesse du son dans la phase k , avec $k = l$ ou $k = g$.

Comme l'ont montré Murrone & Guillard (2005), ce système constitue une limite asymptotique du modèle de Baer & Nunziato (1986) lorsque la pression et la vitesse sont relaxées. Il est également intéressant de noter qu'il est hyperbolique à condition que l'équation d'état thermodynamique soit convexe. Il est de plus particulièrement utile pour simuler des problèmes d'interfaces à fluides séparés où les déséquilibres à l'interface ne jouent pas un rôle important (Saurel & Pantano 2018). Cependant, l'égalité des pressions et vitesses laisse des degrés de

liberté au système et un terme non-conservatif reste présent dans l'équation de transport de la fraction volumique de liquide (eq. (4.2e)) : $\alpha_l (1 - \alpha_l) \frac{\rho_g c_g^2 - \rho_l c_l^2}{\rho_l c_l^2 \alpha_l^{-1} - \rho_g c_g^2 \alpha_g^{-1}} \nabla \cdot \vec{u}$. Ce terme apporte des difficultés numériques qui peuvent notamment conduire dans certains cas à des fractions volumiques négatives. Saurel et al. (2009) proposent de contourner ce problème en ne supposant que l'équilibre des vitesses pour l'étape de transport. Le terme non-conservatif peut alors être remplacé par un terme relaxé moyennant l'ajout d'une équation d'énergie supplémentaire pour prendre en compte le déséquilibre de pression. La pression est ensuite relaxée lors de la résolution hyperbolique du système pour atteindre la pression d'équilibre du mélange. Le modèle de Saurel et al. (2009) est valable en l'absence de choc et s'écrit :

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{u}) = 0 \quad (4.3a)$$

$$\frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{u}) = 0 \quad (4.3b)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + (\alpha_l P_l + \alpha_g P_g) \vec{I}) = 0 \quad (4.3c)$$

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{u} \nabla \alpha_l = K (P_l - P_g) \quad (4.3d)$$

$$\frac{\partial \alpha_l \rho_l e_l}{\partial t} + \nabla \cdot ((\alpha_l \rho_l e_l + \alpha_l P_l) \vec{u}) = -P_i K (P_l - P_g) \quad (4.3e)$$

$$\frac{\partial \alpha_l \rho_g e_g}{\partial t} + \nabla \cdot ((\alpha_g \rho_g e_g + \alpha_g P_g) \vec{u}) = P_i K (P_l - P_g) \quad (4.3f)$$

$$(4.3g)$$

où K est une constante de relaxation, e_k est l'énergie sensible de la phase $k = l$ ou $k = g$ et P_i est la pression d'interface exprimée à partir des impédances acoustiques des phases $Z_k = \rho_k c_k$.

$$P_i = \frac{Z_v P_l + Z_l P_v}{Z_l + Z_v} \quad (4.4)$$

Une autre approche, proposée par Allaire et al. (2002), consiste à négliger le terme non-conservatif présent dans le système de Kapila et al. (2001) réduisant ainsi l'équation de transport de la fraction volumique de liquide à la forme :

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{u} \nabla \alpha_l = 0 \quad (4.5)$$

Bien qu'il soit plus simple, Murrone & Guillard (2005) ont cependant montré que le modèle de Allaire et al. (2002) modifie grandement les ondes caractéristiques du système. En effet, la vitesse du son dans un mélange peut être approximée par le formule de Wood (1930) :

$$\frac{1}{\rho c^2} = \frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2} + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \quad (4.6)$$

Or, contrairement au modèle de Baer & Nunziato (1986) et de Kapila et al. (2001) qui respectent cette formule, la vitesse du son dans le mélange pour le modèle de Allaire et al. (2002) s'écrit :

$$\rho c^2 = \frac{\xi_l \rho_l c_l^2 + \xi_g \rho_g c_g^2}{\alpha_l \xi_l + \alpha_g \xi_g} \quad (4.7)$$

Avec,

$$\xi_{k=l,g} = \left(\frac{\partial \rho_k e_k}{\partial P_k} \right)_{\rho_k} \quad (4.8)$$

Notons tout d'abord que contrairement à la formule de Wood (1930), l'équation (4.7) n'est pas monotone en cas d'utilisation d'une fonction d'état cubique et, peut dans certains cas extrêmes donner des vitesses du son non-physiques lorsque le coefficient ξ_k devient négatif. De plus, bien que la vitesse du son soit bonne dans le cas de phases pures, elle est largement surestimée dans l'interface. Comme souligné par Murrone & Guillard (2005), cette différence peut engendrer des modifications à l'échelle macroscopique si la zone d'interface n'est pas négligeable.

La vitesse du son donnée par le modèle de Saurel et al. (2009) est également différente de la formule de Wood (1930) et répond à la relation suivante, appelée "frozen sound speed" :

$$c^2 = Y_l c_l^2 + Y_g c_g^2 \quad (4.9)$$

où Y_l et Y_g sont respectivement les fractions massiques de liquide et de gaz. Bien que la vitesse du son soit toujours surestimée dans l'interface, cette formule a l'avantage d'être monotone. Ceci fait du système d'équations de Saurel et al. (2009), un modèle dérivé du modèle de Kapila et al. (2001) numériquement plus robuste que celui proposé par Allaire et al. (2002).

4.2.2 Modèle à 4 équations

Notamment proposé pour simuler des écoulements évaporant, cavitant et/ou en ébullition (Saurel et al. 2016), le modèle à 4 équations suppose que les 2 phases soient localement à l'équilibre mécanique (égalité des vitesses et des pressions) et thermique (égalité des températures). Le système (4.2) se réduit à un système à 4 équations de la forme suivante (Saurel et al. 2016) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4.10a)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P \vec{I}) = 0 \quad (4.10b)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \vec{u}) = 0 \quad (4.10c)$$

$$\frac{\partial \rho_k \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \vec{u}) = 0 \quad (4.10d)$$

Dans le système d'équations (4.10), ρ , \vec{u} , P et E représentent respectivement la masse volumique du mélange, la vitesse du centre de masse, la pression et l'énergie totale du mélange. L'équation (4.10d) peut de façon équivalente se formuler en fonction des fractions massiques Y_k :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \vec{u}) = 0 \quad (4.11)$$

Notons que cette forme est particulièrement intéressante pour résoudre des problèmes de combustion, puisque le formalisme du système d'équations est strictement équivalent à celui utilisé dans les codes de combustion monophasique et multi-espèces tel que AVBP.

L'hypothèse d'équilibre mécanique et thermique est toujours valable lorsque les phases sont pures. Cependant, dans le cas d'un mélange local, il revient à supposer que la vitesse de glissement entre les deux phases est absente et que la zone de mélange est suffisamment petite pour

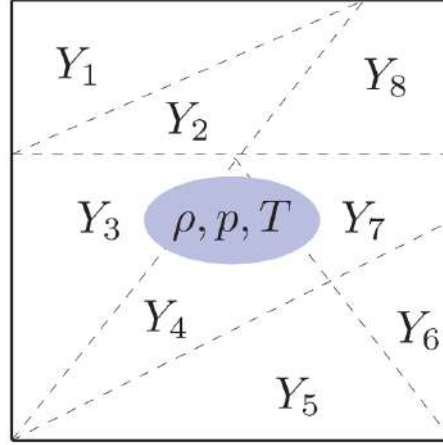


FIGURE 4.1 – Représentation schématique d'un volume élémentaire dans le contexte du modèle à 4 équations : Chaque composant occupe son propre volume quel que soit son état thermodynamique. ρ , P et T sont respectivement la masse volumique, la pression et la température du mélange local. La figure est issue de Deng & Boivin (2020).

atteindre instantanément une température d'équilibre. Ceci signifie que le mélange diphasique peut être vu localement comme un ensemble de petites gouttes, de petites bulles ou une mousse (Saurel et al. 2016). Le mélange n'est donc pas idéal : les espèces en présence occupent leur propre volume et partagent la même pression qu'elles soient en phase liquide ou gazeuse. Notons que dans le cas où le mélange est constitué uniquement de gaz, cette dernière hypothèse est a priori fautive car le mélange est idéal : chaque composant de la phase gazeuse occupe alors tout le volume et la loi de Dalton s'applique ($P = \sum_{k=2}^N P_{\text{partial}}$). Cependant, Chiapolino et al. (2017) ont montré que ces deux visions sont équivalentes si les composants sont des gaz idéaux évoluant à l'équilibre de température et de pression. Les hypothèses du modèle à 4 équations pour un liquide monocomposant ($k = 1$) et un gaz multicomposants ($k = 2, \dots, N$) s'écrivent alors (Chiapolino et al. 2017) :

$$\begin{cases} T = T_k, & \forall k \\ P = P_k, & \forall k \\ v = \sum_{k=1}^N (Y_k v_k) \\ e = \sum_{k=1}^N (Y_k e_k) \end{cases} \quad (4.12)$$

e est l'énergie sensible du mélange et v est son volume spécifique ($1/\rho$). La Figure 4.1 fournit une représentation d'un volume élémentaire considéré dans ce modèle.

Contrairement aux modèles précédents, le système à 4 équations ne comporte pas de terme non-conservatif. Etant complètement conservatif et hyperbolique, sa résolution numérique est donc aisée et directe. Pour une résolution robuste et stable, Saurel & Pantano (2018) recommandent d'utiliser un solveur de Riemann de type HLLC. Cette formulation a été implémentée dans le code AVBP au cours de cette thèse.

4.3 La fermeture thermodynamique du système

La résolution des systèmes d'équations discutés dans la partie précédente nécessite l'utilisation d'une équation d'état reliant la masse volumique ρ , la température T et la pression P .

Cette relation doit être capable de reproduire le comportement thermodynamique de la matière dans la plage de température et de pression considérée pour la simulation numérique.

La Figure 4.2, qui présente un diagramme (P, T) typiquement obtenu pour un fluide pur, montre qu'il peut exister sous forme de plusieurs états, ou phases, selon les conditions thermodynamiques : liquide, gazeux ou solide. Plusieurs états coexistent même le long de la ligne de changement d'état (deux états coexistent) et au point triple t (les trois états coexistent). Or, le comportement thermodynamique du fluide est radicalement différent selon son état. Ceci est dû à la nature des interactions moléculaires qui prédominent. A l'état liquide, les molécules sont proches, ce qui se traduit par une masse volumique élevée, et l'agitation moléculaire est suffisamment faible pour que les forces d'attraction moléculaire dominent les forces de répulsion assurant une phase dense et cohérente. A l'inverse, les molécules sont très éloignées à l'état gazeux (faible masse volumique) de sorte que les forces d'attraction moléculaire, qui ont une distance d'action faible, ont une influence quasi nulle. L'interaction entre les molécules est alors dominée par les forces de répulsion. L'état solide n'est pas traité ici car il est hors du domaine d'intérêt de cette thèse.

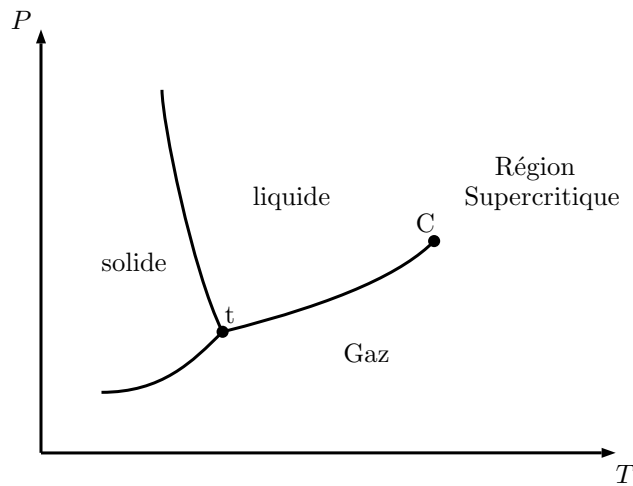


FIGURE 4.2 – Diagramme de phase typique pour une espèce pure. Le point C représente le point critique. Le point t indique le point triple où il y a une coexistence des trois phases.

De nombreuses lois d'état existent pour reproduire le comportement thermodynamique des fluides au niveau macroscopique. La plus simple, et la plus couramment utilisée, est celle des gaz parfaits qui considère que les interactions moléculaires sont régies uniquement par des collisions élastiques. Cette loi d'état, établie au 19^{ème} siècle à partir d'observations expérimentales, propose de relier la pression P , la masse volumique ρ et la température T par la relation suivante :

$$P = \rho r T \tag{4.13}$$

avec $r = R.W^{-1}$, où $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits et W est la masse molaire du mélange. La relation (4.13) donne de très bons résultats lorsque le fluide est à l'état gazeux (pression peu élevée dans le diagramme (P, T)) et sa simplicité motive son utilisation dans une très large gamme de simulations numériques sous-critiques incluant des applications très diverses comme par exemple la simulation de phénomènes météorologiques ou la combustion dans les moteurs aéronautiques. Malheureusement, cette loi simple produit

des erreurs très importantes lorsque la densité du fluide augmente, c'est-à-dire pour les hautes pressions et/ou les basses températures. La déviation du comportement thermodynamique des fluides par rapport au comportement de cette loi d'état est illustrée par l'évolution du facteur de compressibilité Z en fonction de la pression.

$$Z = \frac{P}{\rho r T} \quad (4.14)$$

La Figure 4.3 montre que Z dévie significativement de $Z = 1$ lorsque la pression, et donc la

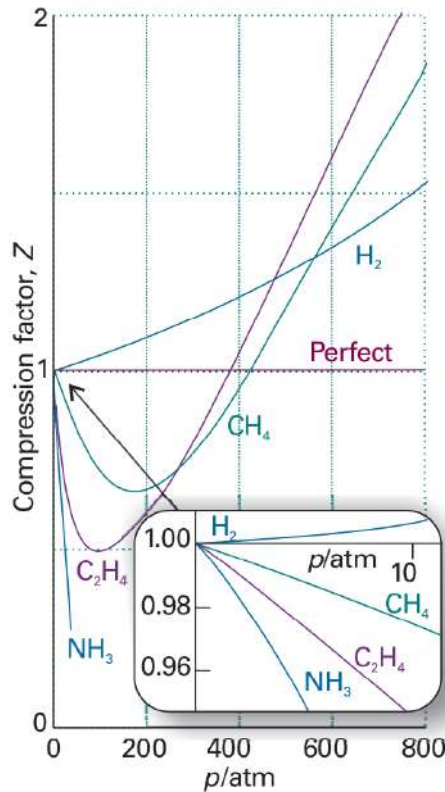


FIGURE 4.3 – Evolution du facteur de compressibilité Z pour différents fluides lorsque la pression varie le long d'un isotherme à 0°C . $Z = 1$ pour toutes les pressions correspond à la théorie des gaz parfaits. Notons que le comportement thermodynamique des fluides est reproduit par la théorie des gaz parfaits $Z = 1$ lorsque la pression relative est faible (tend vers 0). La figure est issue de Atkins & De Paula (2006).

densité, du fluide augmente. Cette théorie est donc inutilisable dans le cas d'écoulement à forte pression et basse température, comme par exemple ceux rencontrés dans les moteurs de fusées, ou encore pour simuler des cas diphasiques, comme ceux de cette thèse, où la masse volumique est élevée.

Afin de corriger ce problème, des relations d'état plus complexes ont alors été établies. L'une des premières à avoir été introduite est celle de Van der Waals (1873). Il propose de modifier le modèle des gaz parfaits (eq. (4.13)) en prenant en compte les effets d'attraction moléculaire et en intégrant le volume propre des molécules, appelé également covolume, dans le calcul des

effets répulsifs. La loi d'état de Van der Waals (1873) s'exprime :

$$P_{VDW} = \frac{\rho r T}{1 - b\rho} - a\rho^2 \quad (4.15)$$

Le premier terme de l'équation (4.15) représente les effets répulsifs corrigés pour exclure le covolume b du volume considéré pour les interactions répulsives. Tandis que le second terme correspond à la correction de la pression nécessaire pour prendre en compte les effets d'attraction moléculaire. Cette influence est supposée être proportionnelle à la masse volumique ρ . Le coefficient a est un coefficient de proportionnalité. Dans le modèle de Van Der Waals, a et b sont définis à partir des propriétés chimiques du fluide indépendamment de la température et de la masse volumique. La Figure 4.4 montre que cette formulation offre une bonne description qualitative du comportement thermodynamique des fluides dans une large gamme de pressions, masses volumiques et températures.

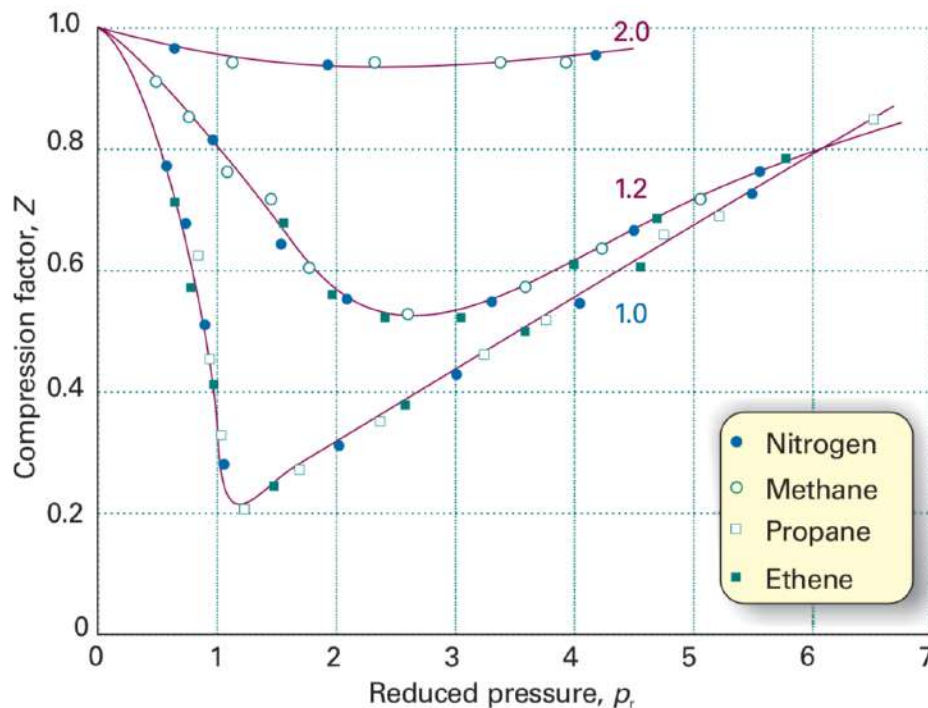


FIGURE 4.4 – Evolution du facteur de compressibilité Z pour différents fluides lorsque la pression réduite $P_r = P/P_c$ varie le long d'un isotherme à $T_r = T/T_c$ dont la valeur indiquée sur la courbe. Les symboles représentent les valeurs expérimentales tandis que les lignes sont construites à partir de la loi de Van der Waals. P_c et T_c représentent les valeurs critiques (point C dans le diagramme (P, T) de la Figure 4.2). La figure est issue de Atkins & De Paula (2006).

Motivé par le besoin d'améliorer quantitativement la description thermodynamique des fluides, de nombreux travaux ont été conduits par la suite pour proposer des relations d'état de Van der Waals améliorées. Le lecteur intéressé pourra se référer au livre de Poling et al. (2001) qui recense un grand nombre de ces relations. Parmi elles, il convient de citer par exemple les équations Soave-Redlich-Kwong (SRK) de Soave (1972) et Peng-Robinson (PR) de Peng & Robinson (1976), définies ci-dessous. Elles améliorent la prédiction du comportement

thermodynamique du fluide en prenant en compte l'influence du covolume b dans le terme d'attraction moléculaire (terme de droite) et faisant varier le coefficient a avec la température.

$$P_{SRK} = \frac{\rho r T}{1 - b\rho} - \frac{a(T)\rho^2}{1 + b\rho} \quad (4.16)$$

$$P_{PR} = \frac{\rho r T}{1 - b\rho} - \frac{a(T)\rho^2}{1 + 2b\rho - \rho^2} \quad (4.17)$$

Comme évoqué précédemment, le grand intérêt de ces équations est qu'elles permettent de prédire le comportement du fluide dans une large gamme de masses volumiques, pressions et températures. Pour cette raison, elles sont notamment utilisées pour simuler des écoulements transcritiques ou supercritiques. Le lecteur intéressé pourra se référer aux travaux de Ihme et al. (2019) qui simule un jet diesel transcritique à l'aide d'une équation de Peng-Robinson ou de Schmitt (2020) qui utilise la relation SRK pour étudier un jet supercritique.

Les équations du type Van Der Waals ont la particularité d'être de forme cubique. Cette propriété est caractérisée dans le diagramme de Clapeyron par une inversion de la pente des isothermes dans le dôme de saturation, appelée zone spinodale. Cette zone est matérialisée en gris dans la Figure 4.5 qui représente un diagramme de Clapeyron typiquement obtenu pour une espèce pure. Pour une pression donnée, différentes valeurs de volume spécifique v , et donc de masse volumique ($1/v$), sont possibles dans cette zone. Ceci traduit la présence d'un mélange diphasique liquide/gaz au cours du changement de phase et permet d'un point de vue mathématique de réaliser la connexion entre l'isotherme du liquide pur et celui de sa vapeur sèche. Notons ici qu'au-dessus du point critique, les isothermes deviennent monotones et la coexistence simultanée de deux phases n'est plus possible. Bien que la nature cubique des équations soit une propriété intéressante d'un point de vue thermodynamique, elle pose un problème majeur pour la résolution des systèmes d'équations discutés précédemment. En effet, la non-convexité de l'équation d'état dans cette zone engendre une perte de l'hyperbolicité du système d'équations. Or, cette dernière est une propriété nécessaire à sa résolution avec les méthodes numériques classiques. Le carré de la vitesse du son c^2 , défini par l'équation (4.18), y est en particulier négatif et la vitesse du son c est donc imaginaire.

$$c^2 = -v^2 \left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_s < 0 \quad (4.18)$$

Afin de préserver l'hyperbolicité du système d'équations, Le Métayer et al. (2004) propose d'utiliser une loi d'état pour chaque phase et de relier les isotropes du diagramme de Clapeyron via un processus cinétique plutôt qu'en suivant le trajet thermodynamique passant par la zone spinodale. En pratique, cela signifie que le liquide et sa vapeur sont transportés dans les simulations numériques par deux équations distinctes. Les deux phases peuvent exister localement mais elles occupent leur propre volume et répondent à leur propre comportement thermodynamique. Lorsque les conditions de saturation sont atteintes, un équilibre local est calculé et le transfert de masse entre les phases liquide et gazeuse se fait pas l'intermédiaire de termes sources dans les équations de transport. Cette stratégie permet d'éviter la zone spinodale mais nécessite la détermination d'une loi d'état capable de prédire le comportement du fluide dans chaque phase pure. Puisque cette thèse traite de la simulation d'écoulement diphasiques sub-critiques, cette approche est adoptée pour sa simplicité d'implémentation et d'utilisation.

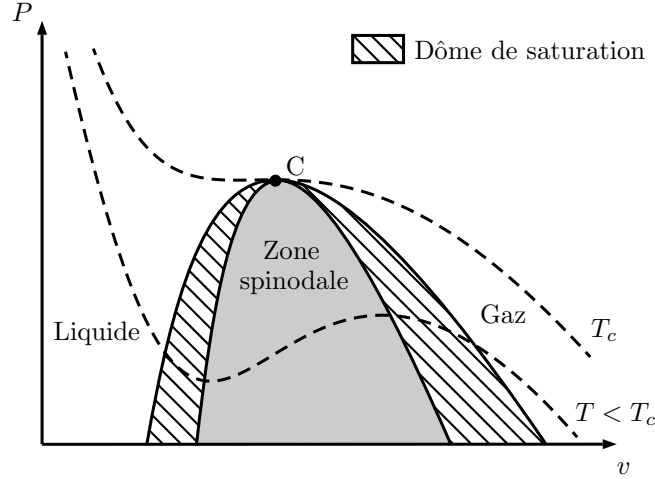


FIGURE 4.5 – Diagramme de Clapeyron (P, v) typique pour une espèce pure. Le point C représente le point critique. Les isothermes à T_c et à $T < T_c$ sont les courbes classiquement prédites avec les lois d'état cubiques. La zone spinodale en gris appartient au dôme de saturation dont le reste est hachuré.

4.3.1 L'équation d'état Stiffened Gas

La loi d'état Stiffened Gas (SG) propose de décrire le comportement d'un fluide à l'état pur gazeux ou liquide à partir de la relation suivante :

$$P = \rho(\gamma - 1) C_v T - P_\infty \quad (4.19)$$

où C_v est la capacité calorifique, γ est le rapport des capacités calorifiques, i.e. $\gamma = C_p/C_v$, et P_∞ est une constante du modèle. Notons que les paramètres C_v et γ sont considérés comme constants dans ce modèle. Le terme de gauche de l'équation (4.19) traduit les effets répulsifs liés à l'agitation moléculaire présents dans tous les états de la matière. Tandis que le terme de droite représente, à travers la constante P_∞ , la contribution des effets d'attraction moléculaire responsables de la cohésion de la matière à l'état liquide. Le coefficient P_∞ est donc nul dans le cas d'un gaz et l'équation (4.19) se transforme alors en relation des gaz parfaits (Le Métayer et al. 2004). L'énergie interne e , l'enthalpie h , l'entropie s du fluide ainsi que le carré de la vitesse du son c^2 sont données par les relations suivantes :

$$e = \frac{P + \gamma P_\infty}{\rho(\gamma - 1)} + q \quad (4.20)$$

$$h = \gamma C_v T + q \quad (4.21)$$

$$s = C_v \ln \left(\frac{T^\gamma}{(P + P_\infty)^{\gamma-1}} \right) + q' \quad (4.22)$$

$$c^2 = \gamma(\gamma - 1) C_v T \quad (4.23)$$

Les équations précédentes font apparaître deux nouvelles constantes, q et q' , liées au modèle qui représentent respectivement une énergie et une entropie de référence. Il est donc nécessaire de déterminer les cinq paramètres C_v , γ , P_∞ , q et q' pour caractériser pleinement le comportement du fluide. Ces paramètres sont établis à partir d'une courbe thermodynamique de référence,

typiquement la courbe de saturation pour les problèmes de transition de phase, selon la stratégie développée par Le Métayer et al. (2004). Remarquons que les paramètres dérivés peuvent différer pour un même fluide selon la plage de températures considérée. Cette dernière s'étale en général sur quelques centaines de Kelvins.

4.3.2 L'équation d'état Noble-Abel Stiffened Gas

Le Métayer & Saurel (2016) ont ensuite considérablement amélioré la précision et la gamme de validité de la formulation Stiffened Gas en ajoutant l'influence du covolume b dans les effets de répulsion moléculaire aux effets d'agitation et d'attraction moléculaire déjà pris en compte. Dans cette nouvelle formulation, appelée Noble-Abel-Stiffened Gas (NASG), la loi d'état s'exprime :

$$P = \frac{\rho(\gamma - 1)C_v T}{1 - \rho b} - P_\infty \quad (4.24)$$

L'énergie interne e , l'enthalpie h et l'entropie s du fluide ainsi que le carré de la vitesse du son c^2 sont alors définies par les relations suivantes :

$$e = \frac{P + \gamma P_\infty}{P + P_\infty} C_v T + q \quad (4.25)$$

$$h = \gamma C_v T + bP + q \quad (4.26)$$

$$s = C_v \ln \left(\frac{T^\gamma}{(P + P_\infty)^{\gamma-1}} \right) + q' \quad (4.27)$$

$$c^2 = \frac{\gamma v^2 (P + P_\infty)}{v - b} \quad (4.28)$$

où $v = 1/\rho$ est le volume spécifique. Cette description permet notamment un meilleur comportement de la masse volumique dans les faibles températures, où ρ n'est plus exactement inversement proportionnel à la température T . Elle corrige également le comportement de la vitesse du son dans les liquides. En effet, la relation (4.23) implique que $\left(\frac{\partial c}{\partial T}\right)_P > 0$ ce qui n'est pas le cas dans la plupart des liquides où la vitesse du son diminue dans les basses températures. Cette correction apparaît dans le terme de droit de l'équation (4.28) reformulé en fonction de la température :

$$c^2 = \gamma(\gamma - 1)C_v T \left(1 + b \frac{P + P_\infty}{(\gamma - 1)C_v T} \right)^2 \quad (4.29)$$

Comme le modèle SG, le modèle NASG contient cinq paramètres, C_v , γ , P_∞ , q et q' , qu'il convient de déterminer. Les travaux de Le Métayer & Saurel (2016) proposent d'utiliser une méthode similaire à celle présentée dans Le Métayer et al. (2004) basée sur les données de la courbe de saturation. Cependant, Boivin et al. (2019) ont montré que cette stratégie conduit à une erreur importante dans la détermination de la capacité calorifique C_v du gaz. Ceci impacte notamment fortement le calcul de l'enthalpie dont la variation en fonction de la température s'écarte fortement de la théorie dans le gaz. Pour corriger ce problème, Boivin et al. (2019) proposent alors de baser la détermination des paramètres sur le comportement du fluide dans une large plage de température plutôt que sur les données à la saturation. Cette méthode permet d'augmenter significativement la gamme de validité du jeu de paramètres tout en gardant une bonne prédiction des propriétés à la saturation. Une version du modèle est également dérivée par Boivin et al. (2019) pour prendre un compte la variation des capacités calorifiques

avec la température. Cette amélioration est particulièrement intéressante puisqu'elle rend possible l'utilisation de la fermeture thermodynamique NASG pour simuler des applications de combustion impliquant une phase liquide dense.

La fermeture thermodynamique NASG a été implémentée dans le code AVBP au cours de cette thèse. Les travaux traitant essentiellement de problèmes à température ambiante et pression atmosphérique et pour ne pas complexifier l'implémentation, les capacités calorifiques y sont supposées constantes. Cependant, toutes les conditions sont requises pour implémenter directement la méthode aux capacités calorifiques variables dans des travaux futurs ouvrant la porte à la simulation de combustion diphasique. Les coefficients sont déterminés par la méthode de Boivin et al. (2019). Un exemple de dérivation est présenté dans la partie 4.3.4 qui développe une approche thermodynamique pour augmenter le pas de temps dans les simulations à faible nombre de Mach.

4.3.3 Extension des équations d'état NASG au cas d'un mélange multicomposants

Afin de gérer la présence de plusieurs composants dans une simulation, il est nécessaire d'étendre les relations thermodynamiques précédentes. Cette extension a été réalisée par Chiapolino et al. (2017) dans le cadre des hypothèses (4.12) du modèle à 4 équations. Ces relations, reprises et implémentées dans le code AVBP, sont présentées dans cette partie. Notons que ces dernières ne sont valables que dans le cas d'un liquide monocomposant ($k = 1$) et d'un gaz multicomposants ($k = 2, \dots, N$). Dans ce qui suit le symbole Y_k fait référence à la fraction massique de l'espèce k avec :

$$\sum_{k=1}^N Y_k = 1 \quad (4.30)$$

La température du mélange peut être facilement déterminée à partir des relations (4.24) ou (4.25) et en considérant les hypothèses (4.12). L'équation (4.24) donne :

$$T(v, P, Y_k) = \frac{v - \sum_{k=1}^N Y_k b_k}{\sum_{k=1}^N \frac{Y_k (\gamma_k - 1) C_{v,k}}{P + P_{\infty,k}}} \quad (4.31)$$

Tandis que l'équation (4.25) permet d'obtenir la formule suivante :

$$T(e, P, Y_k) = \frac{e - \sum_{k=1}^N Y_k q_k}{\sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \left(\frac{P + \gamma_k P_{\infty,k}}{P + P_{\infty,k}} \right)} \quad (4.32)$$

Chiapolino et al. (2017) propose d'exprimer la pression à partir de l'énergie interne e , du volume spécifique v et des fractions de masse Y_k en égalisant les relations (4.31) et (4.32) et en prenant en compte le fait que pour tous les constituants du gaz ($\forall k > 1$) $p_{\infty,k} = 0$ et $b_k = 0$ et qu'il n'y a qu'une seule espèce liquide. La pression s'exprime alors sous la forme de l'expression quadratique suivante :

$$P = \frac{b + \sqrt{b^2 + 4ac}}{2a} \quad (4.33)$$

Avec,

$$\begin{cases} a = \bar{C}_v \\ b = \left(\frac{e - \bar{q}}{v - b} \right) (\bar{C}_p - \bar{C}_v) - P_{\infty,1} \bar{C}_v - P_{\infty,1} Y_1 (C_{p,1} - C_{v,1}) \\ c = \left(\frac{e - \bar{q}}{v - b} \right) P_{\infty,1} [\bar{C}_p - \bar{C}_v - Y_1 (C_{p,1} - C_{v,1})] \end{cases} \quad (4.34)$$

$\bar{\cdot}$ représente les quantités du mélange définies à partir d'une pondération en fractions massiques. \bar{C}_v , \bar{C}_p , \bar{q} et \bar{b} s'exprime alors :

$$\bar{C}_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (4.35)$$

$$\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (4.36)$$

$$\bar{q} = \sum_{k=1}^N Y_k q_k \quad (4.37)$$

$$\bar{b} = \sum_{k=1}^N Y_k b_k \quad (4.38)$$

La relation (4.33) n'est cependant pas simple à intégrer au formalisme du code AVBP puisque la pression y est traditionnellement déterminée à partir de la température T plutôt que directement de l'énergie interne e . Afin de faciliter l'implémentation de la fermeture thermodynamique NASG dans le code AVBP, la pression est donc exprimée à partir de la température T et de la masse volumique $\rho = 1/v$ du mélange. Ce type d'expression peut être dérivée à partir de l'équation (4.31). Comme pour la formule (4.33), il faut prendre en compte le fait que pour tous les constituants du gaz ($\forall k > 1$) $p_{\infty,k} = 0$ et $b_k = 0$ et, qu'il n'y a qu'une seule espèce liquide. La relation obtenue pour la pression se présente alors toujours sous la forme de l'équation quadratique (4.33) mais les coefficients a , b et c valent :

$$\begin{cases} a = -(v - \bar{b}) \\ b = \sum_{k=1}^N Y_k (\gamma_k - 1) C_{v,k} T - P_{\infty,1} (v - \bar{b}) \\ c = \sum_{k>1}^N Y_k (\gamma_k - 1) C_{v,k} P_{\infty,1} T \end{cases} \quad (4.39)$$

La masse volumique et l'énergie interne du mélange sont directement calculées à partir des hypothèses (4.12) et des relations (4.24) et (4.25) :

$$\rho = \frac{1}{v} = \frac{1}{\sum_{k=1}^N Y_k \left(\frac{(\gamma_k - 1) C_{v,k} T}{P + P_{\infty,k}} + b_k \right)} \quad (4.40)$$

$$e = \sum_{k=1}^N Y_k \left(\frac{P + \gamma_k P_{\infty,k}}{P + P_{\infty,k}} C_{v,k} T + q_k \right) \quad (4.41)$$

Pour finir, la vitesse du son dans le mélange liquide/gaz est estimée par une combinaison entre les vitesses du son dans les différents constituants à l'état pur donnée par la formule de Wood (1930) déjà évoquée précédemment.

$$c = \sqrt{\frac{1}{\rho \sum_{k=1}^N \frac{\alpha_k}{\rho_k c_k^2}}} \quad (4.42)$$

où α_k , ρ_k et c_k correspondent à la fraction volumique du composant k dans le mélange et à la masse volumique et la vitesse du son de ce composant à l'état pur. La Figure 4.6 montre l'évolution de la vitesse du son dans un mélange diphasique eau/air en fonction de la fraction volumique de liquide. Elle permet de souligner le caractère non-monotone de la vitesse du son à travers une interface liquide/gaz. Cette dernière diminue très fortement dans l'interface pour atteindre ici une valeur minimale de seulement $c \approx 24$ m/s pour une fraction volumique de liquide de $\alpha = 0.5$ avant de remonter brusquement proches des phases pures.

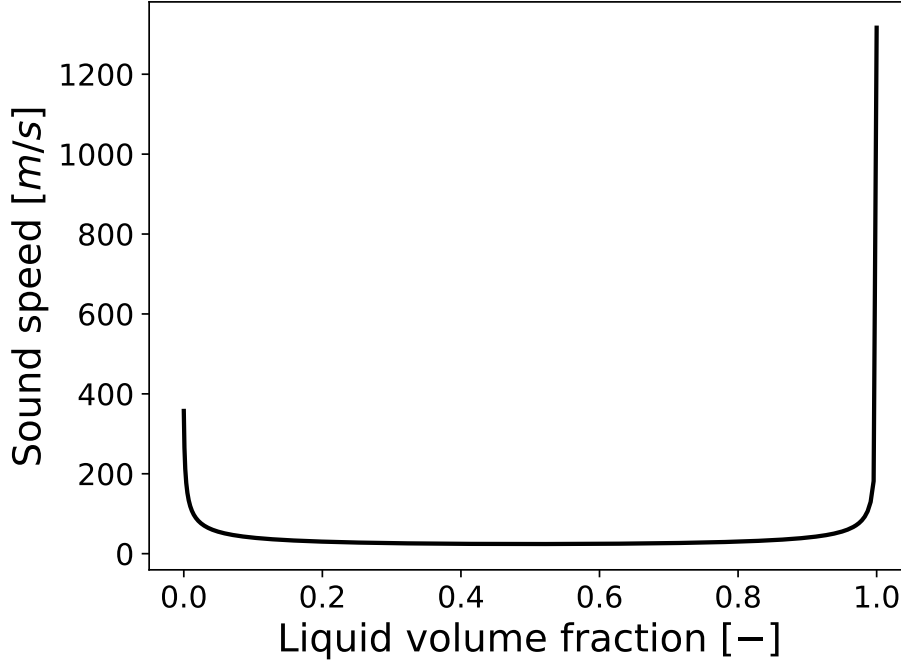


FIGURE 4.6 – Evolution de la vitesse du son dans un mélange diphasique eau/air à pression 1 bar et température 293 K en fonction de la fraction massique de liquide selon l’approximation de Wood (1930) .

4.3.4 Problème de pas de temps pour les écoulements à faible nombre de Mach

Introduction aux méthodes d’accélération pour les écoulements à faible nombre de Mach

La résolution des systèmes d’équations compressibles avec des schémas explicites est soumise à une limitation stricte du pas de temps. Typiquement, le nombre de Courant-Freidrichs-Lewy (CFL) ne doit pas dépasser une certaine valeur (souvent 1) pour garantir la stabilité du schéma.

$$CFL = \frac{(U + c) \Delta t}{\Delta x} \quad (4.43)$$

où U et c sont respectivement la vitesse de l’écoulement et la vitesse du son tandis que Δt et Δx correspondent au pas de temps et au pas d’espace. En pratique, le CFL est généralement fixé par l’utilisateur et le pas de temps est calculé à partir de la définition du CFL (eq. (4.43)), ce qui donne :

$$\Delta t = \frac{CFL \Delta x}{U + c} \quad (4.44)$$

Comme le montre l’équation (4.44), le pas de temps est directement fonction de la vitesse de l’onde acoustique la plus rapide dans l’écoulement, ayant une vitesse de convection $U + c$. Lorsque l’écoulement considéré est à faible nombre de Mach ($M = U/c$), typiquement $M < 0.3$, la vitesse de l’écoulement U devient faible devant la vitesse du son c et le pas de temps est limité par cette dernière valeur. Ceci pose en particulier des problèmes lorsque la vitesse des phénomènes physiques étudiés est très faible comme c’est le cas des instabilités hydrodynamiques.

Le lecteur se remémorera par exemple la vitesse de 1.28 m/s des instabilités étudiées dans le chapitre 2 à mettre en regard de la vitesse du son dans l'eau qui est d'environ 1500 m/s. Pour cette raison, des solveurs incompressible "low-Mach" sont souvent préférés pour simuler ce type d'applications car ils permettent de contourner ce problème en négligeant les ondes acoustiques et les effets de compressibilité dans le calcul.

Des méthodes existent cependant pour augmenter le pas de temps et rendre ainsi intéressante la simulation d'application "low-Mach" avec des solveurs compressibles. Elles sont en général basées sur l'idée de réduire artificiellement la vitesse du son lorsque l'écoulement est à faible nombre de Mach. L'écart entre la vitesse de l'écoulement U et la vitesse du son c est donc plus faible et un pas de temps supérieur peut alors être utilisé sans compromettre la stabilité de la méthode numérique. L'une des méthodes consiste par exemple à ajouter un terme de pénalisation dans les équations. Dans un contexte gaz parfait, cela revient simplement à multiplier les grandeurs thermodynamiques par un coefficient, souvent appelé facteur cryogénique, avant la résolution des équations. Cette méthode, issue des travaux de Ramshaw et al. (1985), est notamment disponible dans le code AVBP et permet d'obtenir une accélération significative des calculs. Son utilisation n'est cependant pas triviale lors de l'utilisation d'une fermeture thermodynamique NASG. Une autre idée consiste à employer une méthode de préconditionnement des équations. Elle est particulièrement appliquées dans le contexte du schéma de Godunov utilisé dans cette thèse. Ce type d'approche a été proposée par Turkel (1987) pour accélérer la convergence de calculs monophasiques vers un état stationnaire. Elle a ensuite été étendue par Guillard & Viozat (1999) pour traiter des cas instationnaires en présence de discontinuités puis, par Murrone & Guillard (2008) pour les cas multiphasiques dans le contexte du modèle à 5 équations de Kapila (système (4.2)) et, par Le Martelot (2013) pour le modèle de Saurel et al. (2009) (système (4.3)). Cette dernière méthode a ensuite été utilisée avec succès pour simuler des écoulements cavitants (Saurel et al. 2009). D'autres méthodes existent encore comme celle développée par Choi & Merkle (1993) et basée sur une résolution à deux pas de temps (un artificiel et un physique). Keshtiban et al. (2004) propose une vue globale de différentes approches existantes.

Dans cette section, nous proposons une méthodologie d'accélération des calculs basées sur la fermeture thermodynamique NASG. Cette méthode permet en particulier de réduire artificiellement la vitesse du son dans le liquide par la modification des constantes de la loi d'état. L'idée est d'utiliser la méthode de détermination des coefficients de Boivin et al. (2019) en faisant l'hypothèse d'une vitesse du son plus faible. La modification de la vitesse du son est alors absorbée par les autres coefficients thermodynamiques afin de reproduire le comportement du liquide. Pour expliciter la méthode, nous proposons de réaliser la dérivation des coefficients de l'eau H_2O dans la suite.

4.3.5 Présentation d'une méthode d'accélération thermodynamique appliquée à la dérivation des coefficients thermodynamiques NASG pour H_2O

Le but ici est de calculer les coefficients thermodynamiques liés à la fermeture NASG pour l'eau à l'état liquide d'une part et à l'état gazeux d'autre part. Ces coefficients sont γ , P_∞ , C_v (ou alternativement C_p), q et b . En pratique, la connaissance de l'entropie de référence q' n'est pas nécessaire pour les calculs. Pour cette raison, la détermination de ce coefficient n'est pas traitée dans cette partie. La plage de dérivation choisie s'étale de 275 K à 475 K et de 0.5 bar à

5 bar. Comme expliqué précédemment, la méthode présentée par Boivin et al. (2019) propose de déterminer les coefficients à partir des courbes d'évolutions thermodynamiques théoriques. Elle nécessite en particulier la connaissance de l'évolution de l'enthalpie h en fonction de la température à P_0 et de la pression à T_0 . $P_0 = 1$ bar et $T_0 = 300$ K représentent une pression et une température de référence correspondant aux conditions standards des calculs réalisés dans cette thèse. Ces courbes présentées en Figure 4.7 sont directement extraites de la base de données NIST (<https://www.nist.gov>).

Détermination des coefficients dans la phase liquide

La capacité calorifique à pression constante C_p ainsi que le covolume b sont donnés par les relations suivantes :

$$C_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_P \quad (4.45)$$

$$b = \left(\frac{\partial h}{\partial P} \right)_T \quad (4.46)$$

Ces deux coefficients sont donc obtenus par une simple regression linéaire sur l'évolution de l'enthalpie en phase liquide. Comme le montre la Figure 4.7, la capacité calorifique $C_{p,l}$ et le covolume b_l du liquide valent alors :

$$\begin{aligned} C_{p,l} &= 4185 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1} \\ b_l &= 9.200 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3.\text{kg}^{-1} \end{aligned}$$

L'énergie de référence est ensuite obtenue en utilisant l'ordonnée à l'origine de l'une des deux courbes de régression linéaire h_{reg} et en appliquant l'une des deux relations suivantes :

$$q = h_{reg}(P = 0, T_0) - C_p T_0 \quad (4.47)$$

$$q = h_{reg}(P_0, T = 0) - b P_0 \quad (4.48)$$

où $h_{reg}(P = 0, T_0)$ correspond à l'ordonnée à l'origine de la courbe de regression linéaire de l'enthalpie en fonction de la pression et $h_{reg}(P_0, T = 0)$ à celle de l'enthalpie en fonction de la température. L'utilisation de l'une ou l'autre devant aboutir à une valeur sensiblement équivalente (Boivin et al. 2019). Dans le cas de l'eau liquide, la valeur obtenue via l'équation (4.47) est :

$$q_l = -1.143 \cdot 10^6 \text{ J.kg}^{-1}$$

Le détermination des deux paramètres restant γ_l et $P_{\infty,l}$ est ensuite réalisée à partir des paramètres précédemment calculés ainsi que du volume spécifique v_0 et de la vitesse du son c_0 au point de référence (P_0, T_0) . Le volume spécifique à (P_0, T_0) vaut $v_0 = 1.0035 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3.\text{kg}^{-1}$ tandis que la vitesse du son est de $c_0 = 1501 \text{ m.s}^{-1}$. Le coefficient γ_l est calculé par la relation suivante obtenue à partir des équations (4.24) et (4.28) :

$$\gamma_l = \frac{c^2 (v_0 - b)^2}{v_0^2 C_p T} + 1 \quad (4.49)$$

Puis, le coefficient $P_{\infty,l}$ est obtenu en inversant l'équation d'état (4.24) :

$$P_{\infty,liq} = \frac{(\gamma - 1) C_p T}{\gamma (v - b)} - P \quad (4.50)$$

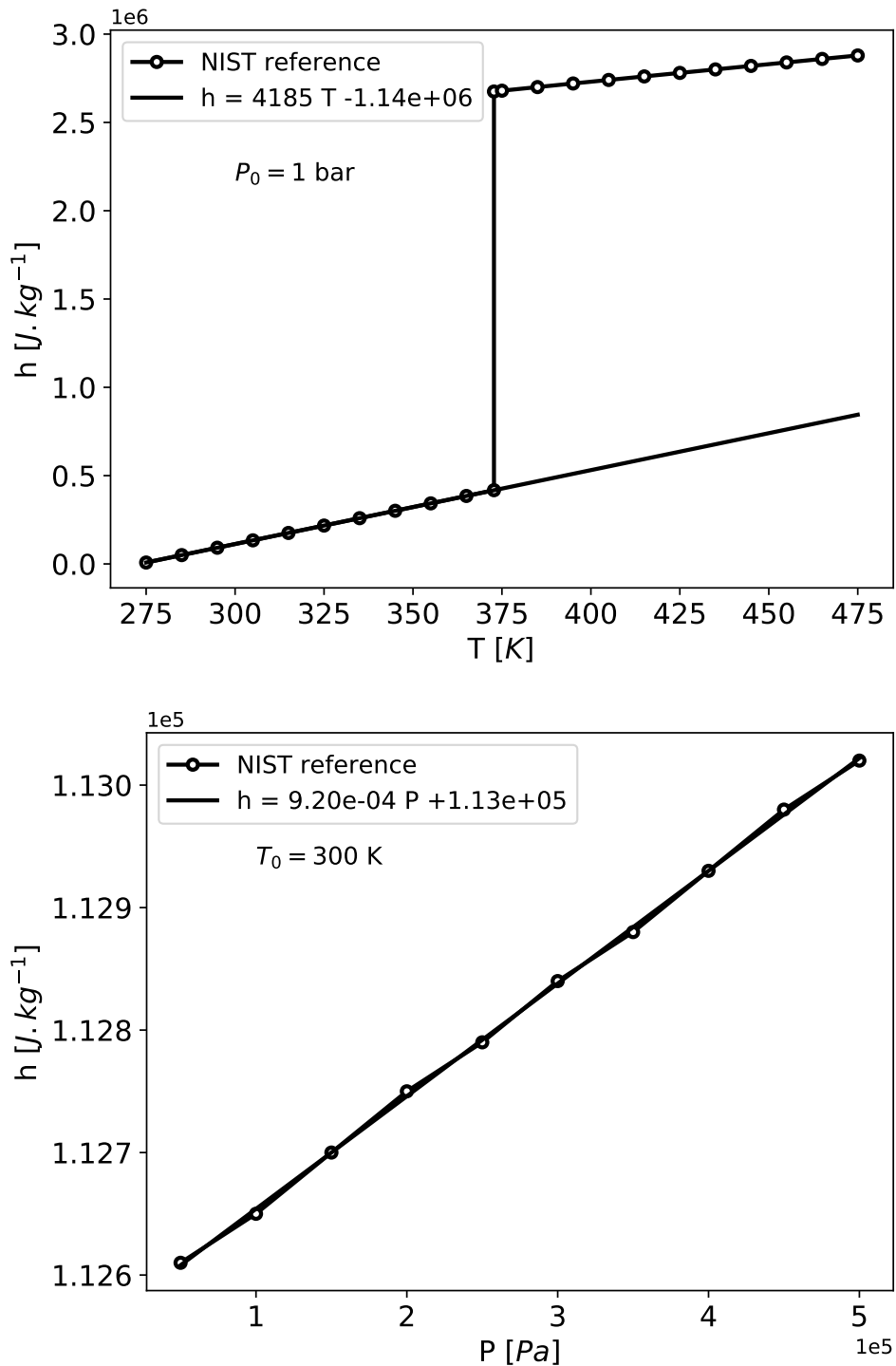


FIGURE 4.7 – Evolution de l’enthalpie h de l’eau H_2O avec la température T à une pression $P_0 = 1$ bar (en haut) et en fonction de la pression P à une température $T_0 = 300$ K (en bas). Les courbes de référence (traits noirs avec ronds blancs) sont issues de NIST (<https://www.nist.gov>). Les traits noirs sans symboles sont des régressions linéaires réalisées à partir des courbes de référence. Dans la figure du haut, la régression a été réalisée en ne considérant que la partie de la courbe en phase liquide.

L'application des relations (4.49) et (4.50) au cas présent donne :

$$\begin{aligned}\gamma_l &= 1.012 \\ P_{\infty,l} &= 1.846 \cdot 10^8 \text{ Pa}\end{aligned}$$

Puisque cette méthode s'appuie sur des valeurs de références v_0 et c_0 , nous proposons de diminuer arbitrairement la vitesse du son de référence c_0 pour que celle-ci soit également à la vitesse du son dans l'air au point (P_0, T_0) soit : $c_0 = 352 \text{ m/s}$. Cette modification est alors directement absorbée par les coefficients γ_l et $P_{\infty,l}$ via les équations (4.49) et (4.50) dont les nouvelles valeurs sont :

$$\begin{aligned}\gamma_{liq} &= 1.001 \\ P_{\infty,liq} &= 1.027 \cdot 10^7 \text{ Pa}\end{aligned}$$

La Figure 4.8 montre l'évolution de la masse volumique ρ , de l'énergie interne e et de l'enthalpie h dans la plage de températures considérée. Il peut être observé que le changement de vitesse du son dans le liquide n'a aucun impact sur la prédiction de ces grandeurs thermodynamiques par le modèle NASG. En revanche, le pas de temps résultant de l'équation (4.44) est quant à lui augmenté d'un facteur d'environ 4.25 grâce à la diminution de la vitesse du son dans le liquide à (P_0, T_0) de $c = 1501 \text{ m.s}^{-1}$ à 352 m.s^{-1} . Cette méthode est valable dès lors que l'acoustique ne joue pas un rôle important dans la dynamique de l'écoulement. C'est le cas des écoulements étudiés dans cette thèse. Il convient pour finir de remarquer un léger écart dans la prédiction de la masse volumique proche de la saturation. Cette écart provient de la méthode de détermination de Boivin et al. (2019) qui préfère se concentrer sur la prédiction du comportement thermodynamique global du fluide plutôt que sur les valeurs à la saturation. Il est possible d'améliorer la prédiction de ces valeurs en utilisant la technique de détermination des coefficients proposée par Le Métayer et al. (2004). Cependant, Boivin et al. (2019) ont montré que cette dernière technique conduit à une moins bonne prédiction du comportement thermodynamique global du fluide. De plus, l'écart maximum par rapport à la référence étant dans notre cas d'environ 18 kg.m^{-3} , soit $+1.85\%$ par rapport la masse volumique de référence, il peut être considéré comme négligeable.

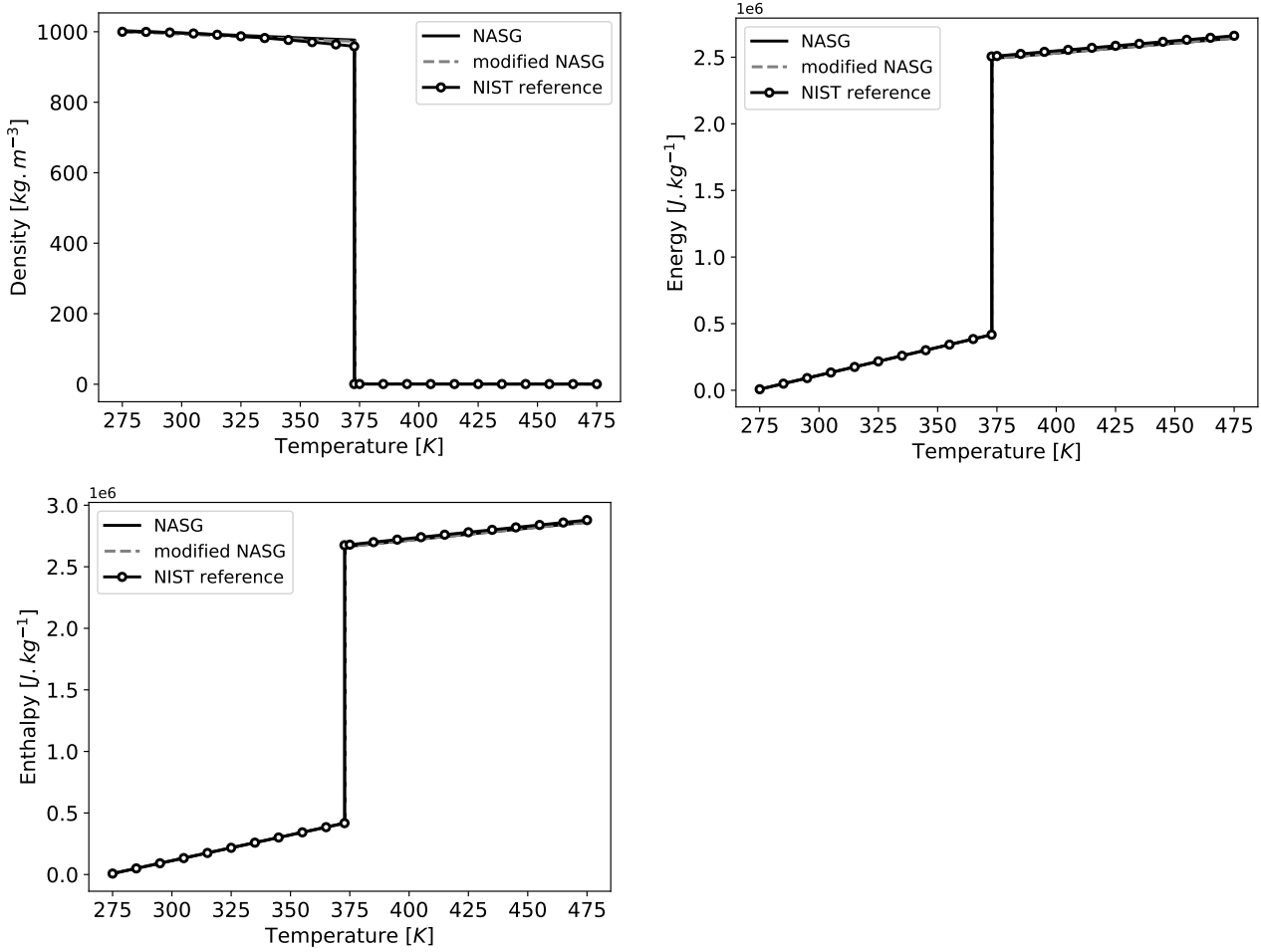


FIGURE 4.8 – Evolution de la masse volumique ρ , de l'énergie interne e et de l'enthalpie h de l'eau H_2O en fonction de la température T à une pression $P_0 = 1$ bar. Les courbes de référence (traits noirs avec ronds blancs) sont issues de NIST (<https://www.nist.gov>). Les traits noirs sans symboles et en gris pointillés sont respectivement les valeurs prédites par les équations d'état NASG avec des coefficients issus d'une dérivation sans modification (NASG) et avec modification de la vitesse du son (modified NASG).

Détermination des coefficients dans la phase gazeuse

Dans la phase gazeuse, le modèle NASG suppose que le covolume b_g et le coefficient $P_{\infty,g}$ sont nuls. L'équation d'état se réduit alors à une loi des gaz parfait et la relation de Mayer s'applique. Elle relie les capacités calorifiques à pression constante $C_{p,g}$ et à volume constante $C_{v,g}$ à la masse molaire du mélange W (18 g.mol⁻¹ pour H_2O) et à la constante universelle des gaz parfait $R = 8.314$ J.mol⁻¹.K⁻¹ par la relation suivante :

$$C_{p,g} - C_{v,g} = \frac{R}{W} \quad (4.51)$$

Grâce à l'équation (4.51), la détermination de l'un des coefficients donne directement l'autre ainsi que le rapport des capacités calorifiques dans le gaz γ_g . Plusieurs méthodes peuvent ici être utilisées pour trouver $C_{p,g}$ ou $C_{v,g}$. Comme pour le liquide, le coefficient $C_{p,g}$ peut être donné via l'équation (4.45) par une regression linéaire sur l'évolution de l'enthalpie en phase

gazeuse en fonction de la température (méthode 1). Boivin et al. (2019) proposent plutôt de déterminer le coefficient $C_{v,g}$ en choisissant sa valeur minimale dans la plage de températures considérée (Méthode 2). La Figure 4.9 présente la courbe référence d'évolution de la capacité calorifique C_v dans la gamme de températures considérée. Le tableau 4.1 donne les coefficients $C_{p,g}$, $C_{v,g}$ et γ_g obtenus avec ces deux méthodes.

Coefficients	Méthode 1	Méthode 2
$C_{p,g}$ [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]	1992	1955
$C_{v,g}$ [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]	1530	1494
γ_g [-]	1.302	1.309

TABLE 4.1 – Capacités calorifiques à pression constante $C_{p,g}$ et volume constant $C_{v,g}$ de l'eau H_2O en phase gazeuse obtenues avec la méthode 1 et la méthode 2. γ_g correspond au rapport de ces capacités calorifiques.

Le Tableau 4.1 permet de constater que ces méthodes aboutissent à des résultats relativement similaires. Dans cette thèse, les coefficients issus de la méthode proposée par Boivin et al. (2019) (méthode 2) sont arbitrairement utilisés.

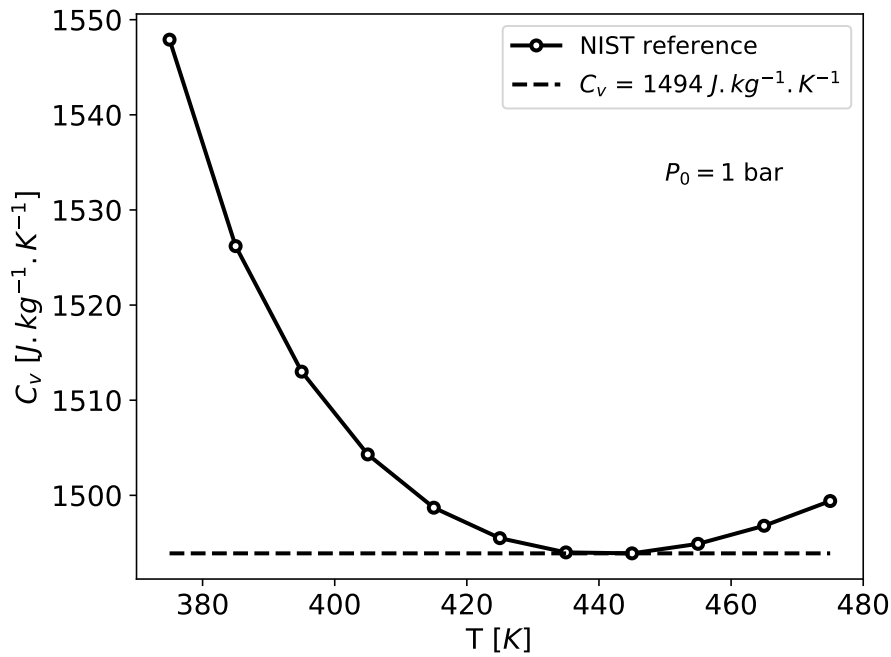


FIGURE 4.9 – Evolution de la capacité calorifique de l'eau H_2O en phase gazeuse à volume constant C_v en fonction de la température T à une pression $P_0 = 1 \text{ bar}$. La courbe de référence (trait noir avec des ronds blancs) est issue de NIST (<https://www.nist.gov>). La droite en pointillée correspond à la calorifique C_v déterminée à partir de la méthode proposée par Boivin et al. (2019) (méthode 2).

Afin de fermer le système thermodynamique, il reste à déterminer l'énergie de référence q . Cette valeur est obtenue à partir l'équation (4.48). Comme le covolume b_g est nul, l'énergie de référence correspond à l'ordonnée à l'origine de la droite donnée par une régression linéaire sur

l'évolution de l'enthalpie en fonction de la température à P_0 en phase gazeuse (Figure 4.10). Pour l'eau à l'état gazeux, l'énergie de référence vaut :

$$q_g = 1.933 \cdot 10^6 \text{ J.kg}^{-1}$$

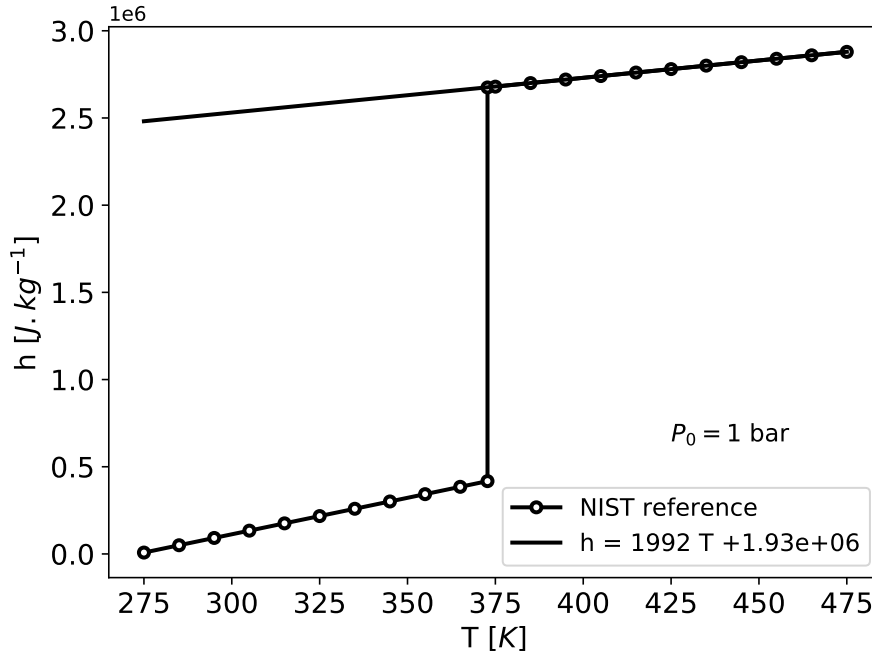


FIGURE 4.10 – Evolution de l'enthalpie h de l'eau H_2O avec la température T à une pression $P_0 = 1 \text{ bar}$. La courbe de référence (trait noir avec ronds blancs) est issues de NIST (<https://www.nist.gov>). Le trait noirs sans symboles est la droite de régression linéaire réalisée en considérant la partie de la courbe de référence en phase gazeuse.

Le Tableau 4.11 résume les coefficients déterminés dans cette partie pour l'eau liquide H_2O . "modified H_2O " fait référence aux coefficients trouvés en diminuant la vitesse du son dans le liquide pour la ramener à celle dans l'air.

Coefficients	H_2O_l	modified H_2O_l	H_2O_g
C_p [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]	4185	4185	1955
C_v [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]	4135	4180	1494
γ [-]	1.012	1.001	1.309
P_∞ [Pa]	$1.846 \cdot 10^8$	$1.027 \cdot 10^7$	0
q [$J.kg^{-1}$]	$-1.143 \cdot 10^6$	$-1.143 \cdot 10^6$	$1.933 \cdot 10^6$
b [$m^3.kg^{-1}$]	$9.2 \cdot 10^{-4}$	$9.2 \cdot 10^{-4}$	0

FIGURE 4.11 – Coefficients NASG pour l'eau H_2O déterminés dans la gamme de températures [275-475 K] et de pressions [0.5-5 bar] avec (modified H_2O_l) et sans (H_2O_l) modification de la vitesse du son dans le liquide.

4.4 Développement d'un schéma numérique de Godunov dans le code AVBP

La résolution du système d'équations (4.10) nécessite une méthode adaptée capable de gérer la présence de forts gradients de masse volumique à l'interface liquide/gaz sans la diffuser excessivement. Les méthodes numériques historiquement présentes dans AVBP (Lax-Wendroff, TTG4A et TTGC) gèrent mal les discontinuités dans l'écoulement occasionnant la diffusion et/ou l'apparition d'instabilités numériques proches des discontinuités. Nous proposons donc de développer un schéma de Godunov pour résoudre la partie hyperbolique des équations.

4.4.1 Le schéma numérique de Godunov

Soit U le vecteur solution du système d'équations (4.10) et F le vecteur des flux.

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \\ \rho Y_k \end{bmatrix} \quad (4.52)$$

$$F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho E + P)u \\ \rho u Y_k \end{bmatrix} \quad (4.53)$$

Le système (4.10) peut alors s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot F = 0 \quad (4.54)$$

Ce système peut être résolu à l'aide d'une approche volume fini. Cette méthode consiste à approximer localement la solution par sa valeur moyenne \bar{U} sur un volume de contrôle. Ceci signifie que la solution est constante par partie dans tout le domaine et vaut dans chaque volume de contrôle V :

$$\bar{U} = \frac{1}{V} \iiint_V U dV \quad (4.55)$$

En appliquant ce formalisme au système d'équations (4.54), il s'écrit alors :

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{1}{V} \iiint_V \nabla \cdot F dV = 0 \quad (4.56)$$

L'application du théorème de Green-Ostrogradski au second terme de l'équation précédente donne :

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{1}{V} \iint_{\partial V} F \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (4.57)$$

où ∂V représente la frontière du volume de contrôle V , dS est un élément infinitésimal de la frontière du volume de contrôle et \vec{n} est le vecteur unitaire normal à la surface dS dirigé vers l'extérieur du volume de contrôle.

L'évaluation du flux à travers la frontière du volume de contrôle n'est pas trivial dans la mesure où la solution \bar{U} est discontinue entre les volumes de contrôle. Pour résoudre ce problème, Godunov (1959) propose tout d'abord d'adopter une approche discrète en approximant l'intégrale du flux par la somme des flux aux interfaces du volume de contrôle.

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{1}{V} \sum_{dS \in \partial V} F \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (4.58)$$

Son idée est ensuite d'assimiler à un problème de Riemann chaque discontinuité aux interfaces avec les volumes de contrôle voisins. La résolution du problème de Riemann permet alors de déterminer le flux $F \cdot \vec{n}$ normal à chaque interface du volume de contrôle. Le problème de Riemann ainsi que sa résolution sont expliqués dans la suite.

4.4.2 Les solveurs de Riemann

Le problème de Riemann

Le problème de Riemann est un problème fondamental pour la résolution des systèmes d'équations hyperboliques. Soit $B(x, t) \in \mathbb{R}$ l'inconnu du système hyperbolique d'équations :

$$\frac{\partial B(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(B(x, t))}{\partial x} = 0 \quad (4.59)$$

où $f(B(x, t))$ est le flux de $B(x, t)$. Le problème est dit de Riemann lorsque la solution initiale du système $B(x, t = 0)$ est composée de deux parties constantes dans le domaine d'intérêt et d'une discontinuité (Figure 4.12).

$$B(x, t = 0) = B_0(x) = \begin{cases} B_L & \text{si } x < x_0 \\ B_R & \text{si } x > x_0 \end{cases} \quad (4.60)$$

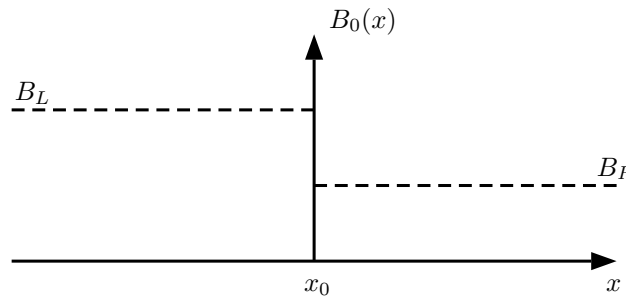


FIGURE 4.12 – Solution initiale type d'un problème de Riemann.

Problème de Riemann appliqué aux équations d'Euler

La nature non-linéaire des équations du système de type Euler (4.54) ne permet pas d'obtenir une formulation analytique de la solution du problème. Deux grandes familles de solveurs existent pour résoudre numériquement ce problème. La première famille est constituée des solveurs exacts dont le plus connu est celui présenté par Godunov (1959). Ces solveurs permettent

de donner une solution très précise du problème de Riemann mais s'appuient sur une méthode itérative qui les rend coûteux. La seconde famille est constituée des solveurs approximatifs qui donne une estimation de la solution au problème de Riemann. Même s'ils ne sont pas aussi précis que les solveurs exacts, ces solveurs sont capables de donner la solution en une seule étape ce qui présente un grand avantage en terme de coût de calcul. Cette seconde famille est donc préférée lorsqu'un grand nombre de problèmes de Riemann doit être résolu comme c'est le cas à chaque itération temporelle de la résolution des équations d'Euler avec le schéma de Godunov sur un grand domaine de calcul.

Les solveurs approximatifs Harten-Lax-Leer (HLL) et Harten-Lax-Leer Contact (HLLC) sont détaillés dans la suite. Leur présentation est précédée d'une analyse de la structure des ondes caractéristiques du système d'équations (4.54) nécessaire pour comprendre la suite. La famille des solveurs exacts n'est quant à elle pas détaillée dans cette thèse. Le lecteur intéressé pourra cependant se référer au livre de Toro (2009) pour plus d'informations.

Formulation caractéristique du système d'équations

Pour des raisons de simplicité et pour ne pas gêner la clarté des explications, le système d'équations (4.54) est ramené à une seule dimension dans cette partie ainsi que dans la présentation des solveurs approximatifs. Il s'écrit donc :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \quad (4.61)$$

Avec,

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \\ \rho Y_k \end{bmatrix} \quad (4.62)$$

et,

$$F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho E + P)u \\ \rho u Y_k \end{bmatrix} \quad (4.63)$$

Afin de faire apparaître ses ondes caractéristiques, le système (4.61) est exprimé sous une forme non-conservative du type :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + A(W) \frac{\partial W}{\partial x} = 0 \quad (4.64)$$

Dans le système (4.64), W est le vecteur des variables primitives :

$$W = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ P \\ Y_k \end{bmatrix} \quad (4.65)$$

$A(W) = \frac{\partial F}{\partial W}$ correspond à la matrice Jacobienne des flux et s'exprime :

$$A(W) = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 & 0 \\ 0 & u & 1/\rho & 0 \\ 0 & \rho c^2 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u \end{bmatrix} \quad (4.66)$$

où, le carré de la vitesse du son du système c^2 est donné par l'équation :

$$c^2 = \frac{\frac{P}{\rho^2} - \frac{\partial e}{\partial \rho} | P}{\frac{\partial e}{\partial P} | \rho} \quad (4.67)$$

où e correspond à l'énergie interne du système.

La diagonalisation de la matrice Jacobienne $A(W)$ permet de faire apparaître les ondes caractéristiques du système (4.61). Ces ondes correspondent aux valeurs propres de la matrice $A(W)$: $u + c$, $u - c$ et u . Le système d'Euler est donc constitué de trois ondes caractéristiques :

- Une onde de choc de vitesse $u - c$ ou $u + c$ en fonction de la direction de l'écoulement. Les lignes caractéristiques dans l'espace (x, t) convergent vers l'onde.
- Une onde de détente de vitesse $u - c$ ou $u + c$ en fonction de la direction de l'écoulement. Les lignes caractéristiques dans l'espace (x, t) sont divergentes et crée un éventail de détente.
- Une discontinuité de contact de vitesse u . La pression et la vitesse sont constantes à travers une discontinuité de contact mais l'entropie peut être discontinue.

La Figure 4.13 montre les configurations d'ondes possibles.

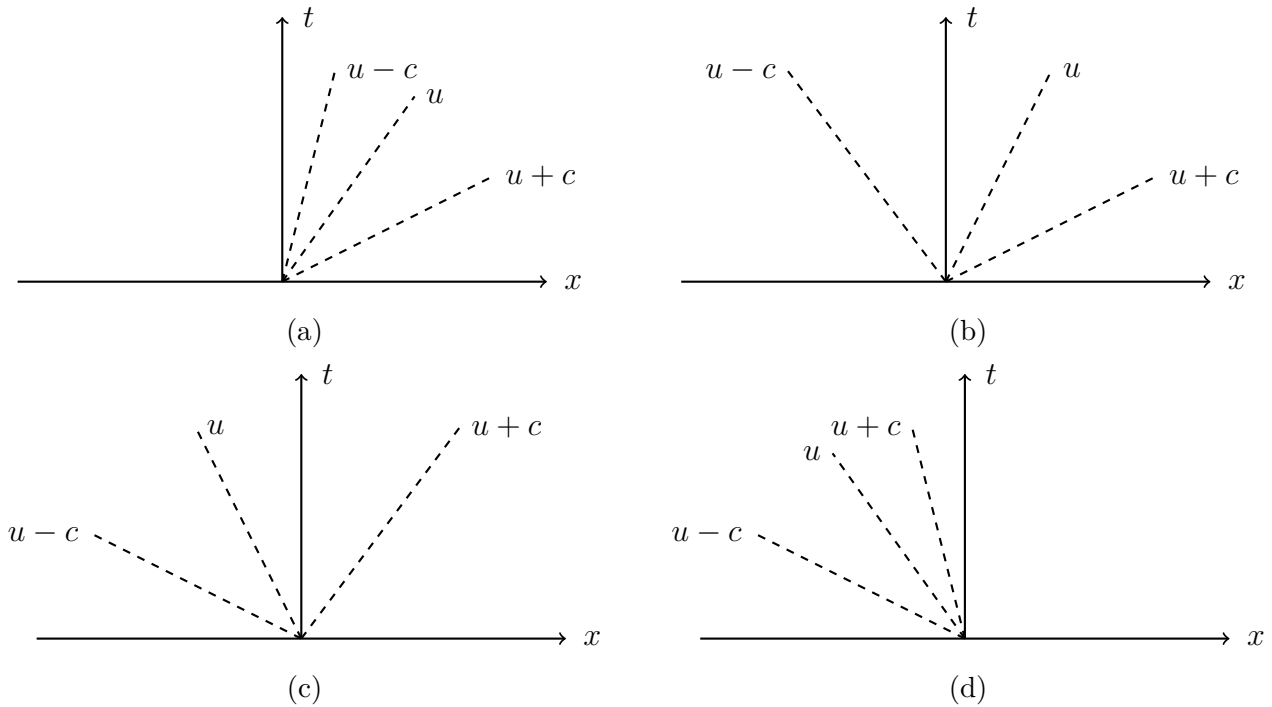


FIGURE 4.13 – Configurations d'ondes possibles du système d'Euler. (a) et (d) correspondent à des configurations supersoniques tandis que (b) et (c) sont des configurations subsoniques.

Solveur approximé de Harten-Lax-Leer (HLL)

Proposé par Harten et al. (1983), le solveur approximé de Harten-Lax-Leer (HLL) simplifie le problème de Riemann en considérant trois états constants séparés par deux ondes. L'onde de contact est négligée et la zone centrale du diagramme est alors constituée d'un unique état, appelé état "*HLL*". La Figure 4.14 représente la structure d'onde considérée. Pour exprimer

cette état "HLL", le système d'Euler sous la forme conservative est intégré dans un volume de contrôle rectangulaire de taille (X, T) dans le domaine (x, t) .

$$\iint_{T,X} \left(\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} \right) dx dt = 0 \quad (4.68)$$

L'application du théorème de Green à l'équation (4.68) permet d'obtenir les équations d'Euler sous une formulation faible :

$$\oint U dx - F dt = 0 \quad (4.69)$$

Ce qui donne :

$$U_R X_R - F_R T + U_{HLL} (X_L - X_R) + F_L T - U_L X_L = 0 \quad (4.70)$$

où $U_R, X_R, F_R, U_L, X_L, F_L, U_{HLL}$ et T sont illustrés dans la Figure 4.14. L'état U_{HLL} s'exprime alors simplement à partir des conditions à gauche et à droite autour de l'interface.

$$U_{HLL} = \frac{F_R - F_L + U_L S_L - U_R S_R}{S_L - S_R} \quad (4.71)$$

avec :

$$S_L = \frac{X_L}{T} \quad (4.72)$$

et

$$S_R = \frac{X_R}{T} \quad (4.73)$$

Le flux correspondant F_{HLL} est ensuite calculé par l'une des relations suivantes :

$$F_{HLL} = F_L + S_L (U_{HLL} - U_L) \quad (4.74)$$

ou

$$F_{HLL} = F_R + S_R (U_{HLL} - U_R) \quad (4.75)$$

Le flux à travers l'interface est déterminé par une simple comparaison de la direction des ondes S_L et S_R :

$$F = \begin{cases} F_L & \text{si } S_L > 0 \\ F_{HLL} & \text{si } S_L \leq 0 \leq S_R \\ F_R & \text{si } S_R \leq 0 \end{cases} \quad (4.76)$$

Les vitesses S_L et S_R des ondes peuvent être simplement estimées à partir des conditions de chaque côté de l'interface par les relations proposées par Davis (1988) :

$$S_L = \min(u_R - c_R, u_L - c_L) \quad (4.77)$$

$$S_R = \max(u_R + c_R, u_L + c_L) \quad (4.78)$$

Solveur approximé de Harten-Lax-Leer Contact (HLLC)

La solution pour les équations d'Euler donnée par le solveur approximé de Riemann peut être améliorée par la prise en compte des trois ondes caractéristiques du système. En ce sens, les travaux de Toro et al. (1994) proposent un nouveau solveur appelé HLL-Contact (HLLC) qui repose sur une amélioration le solveur HLL par la restauration de l'onde de contact. La

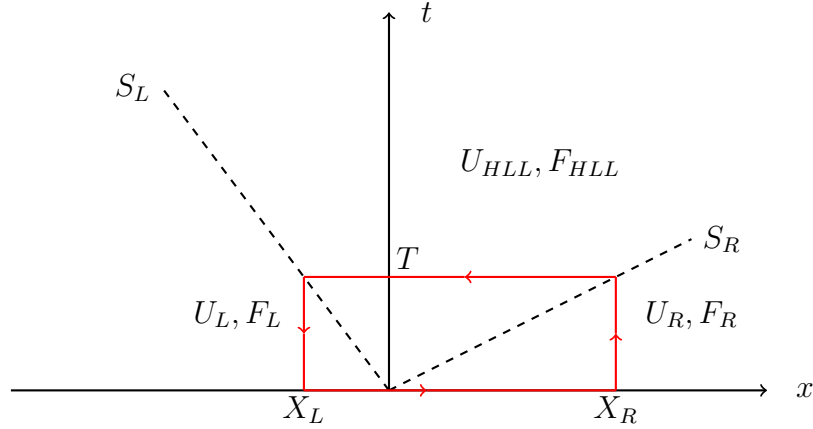


FIGURE 4.14 – Structure d’ondes dans le solveur HLL. Le rectangle rouge est un exemple de volume de contrôle considéré pour le calcul de la vitesse U_{HLL} .

Figure 4.15 représente la structure d’ondes considérée. Quatre états constants séparés par trois ondes, S_L , S_R et S_M , sont alors considérés et la solution approximée du problème est donnée par l’expression suivante :

$$F = \begin{cases} F_L & \text{si } S_L > 0 \\ F_L^* & S = S_L \text{ si } S_M > 0 \\ F_R^* & S = S_R \text{ si } S_M < 0 \\ F_R & \text{si } S_R < 0 \end{cases} \quad (4.79)$$

Alors que l’onde la plus lente S_L et la plus rapide S_R sont toujours exprimées par les équations (4.77) et (4.78), la vitesse de l’onde S_M doit être défini à partir de l’état de l’écoulement. Cette onde étant une discontinuité de contact, elle assure la continuité de la pression $P_L^* = P_R^* = P^*$ et de la vitesse $u_L^* = u_R^* = u^*$. Se faisant, Davis (1988) propose d’approximer sa vitesse S_M à partir de l’état U_{HLL} exprimé précédemment par la relation :

$$S_M = \frac{(\rho u)_{HLL}}{\rho_{HLL}} \quad (4.80)$$

Les états U_L^* et U_R^* sont obtenus en appliquant les relations de saut de Rankine-Hugoniot respectivement à travers les ondes S_L et S_R . En posant $K = L$ ou $K = R$, les états U_L^* et U_R^* s’expriment :

$$U_K^* = \rho_K \left(\frac{S_M - u_K}{S_K - S_M} \right) \begin{bmatrix} 1 \\ S_M \\ \frac{E_K}{\rho_K} + (S_M - u_K) \left[S_M + \frac{P_K}{\rho_K(S_K - u_K)} \right] \\ Y_k \end{bmatrix} \quad (4.81)$$

Les flux des états intermédiaires sont exprimés par la relation suivante :

$$F_K^* = F_K + S_K (U_K^* - U_K) \quad (4.82)$$

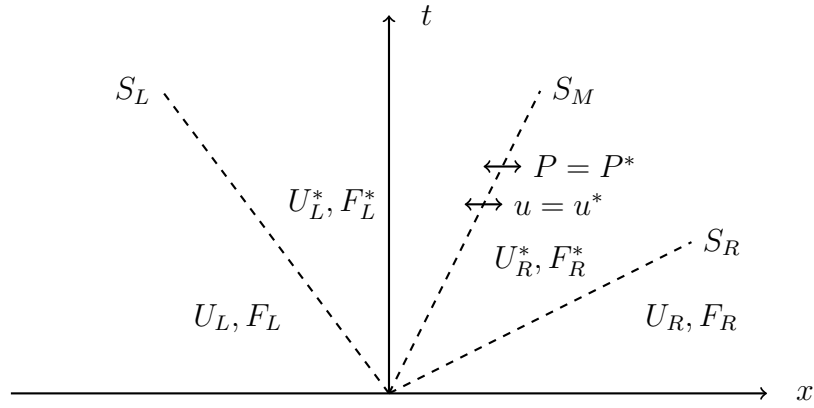


FIGURE 4.15 – Structure d'onde dans le solveur HLLC.

4.4.3 Montée en ordre : La reconstruction MUSCL

Bien que les méthodes présentées précédemment soient très robustes pour capturer les chocs, la précision numérique résultante est uniquement d'ordre un en espace (Toro 2009). Ceci vient du fait que l'on considère des états de gauche et de droite constants ce qui n'est pas le cas dans un écoulement. Initialement proposée par Van Leer (1979), l'approche MUSCL, pour Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws, consiste à extrapoler la valeur au centre d'une cellule i pour reconstruire sa valeur aux interfaces, en $i - 1/2$ et $i + 1/2$ pour un problème 1D. Le choix de la fonction d'extrapolation donne l'ordre du schéma. Ainsi, le choix d'une fonction linéaire permet d'obtenir un schéma à l'ordre deux. Considérons la configuration 1D de la Figure 4.16. En supposant un champ scalaire u , la valeur reconstruite $u_{i+1/2}$ à l'interface de la cellule i est définie par :

$$u_{i+1/2} = u_i + \frac{x_{i+1/2} - x_i}{x_{i+1} - x_i} (u_{i+1} - u_i) \quad (4.83)$$

x_i est la position de la cellule i . En considérant que l'interface $i + 1/2$ est à mi-distance entre le centre des cellules i et $i + 1$, la relation (4.83) peut se simplifier de la façon suivante :

$$u_{i+1/2} = u_i + \Delta_i u \quad (4.84)$$

où $\Delta_i u$ est le gradient du scalaire u au centre de la cellule i . Pour les systèmes d'équations

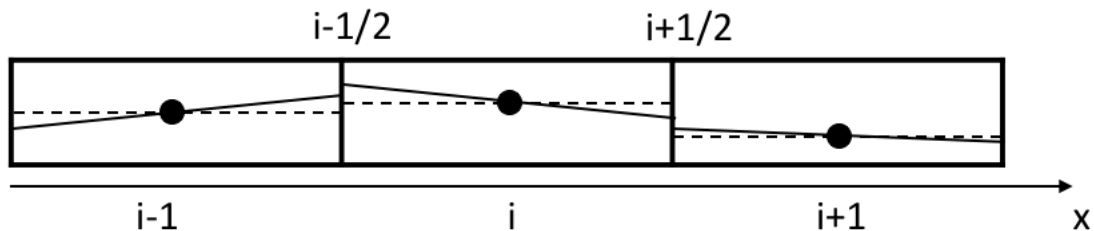


FIGURE 4.16 – Schéma présentant un exemple de reconstruction MUSCL en 1D. Les pointillés représentent l'ordre 1 tandis que les lignes illustrent la reconstruction MUSCL obtenue. Les points sont les valeurs au centre des cellules.

de type Euler, l'étape de reconstruction est généralement réalisée sur le vecteur des variables primitives W puis le vecteur $U^{i+/-1/2}$ des variables conservatives en $x_{i+/-1/2}$ est recalculé à partir des grandeurs reconstruites.

La méthode de reconstruction MUSCL ne préserve malheureusement pas la monotonie du schéma numérique c'est-à-dire qu'elle autorise la création d'extrema locaux provoquant des oscillations dans la solution aux abords des discontinuités. Ceci se traduit par la perte d'une propriété de stabilité essentielle pour le schéma numérique appelée "Total Variation Diminishing". Cette propriété se base sur la notion de variation totale TV qui est définie comme l'intégrale des gradients sur tout le domaine D . Pour un cas continu et en une dimension d'espace, elle s'écrit :

$$TV(U) = \int_D \left| \frac{\partial U}{\partial x} \right| dx \tag{4.85}$$

En formulation discrète, la formule (4.85) devient :

$$TV(U) = \sum_{i=1}^N |U_i - U_{i-1}| \tag{4.86}$$

où N représente le nombre de volume de contrôle dans le maillage. Un schéma numérique est dit TVD si, et seulement si, la variation totale des grandeurs conservatives $TV(U)$ décroît au court du temps.

$$TV(U)^{n+1} \leq TV(U)^n \leq \dots \leq TV(U)^0 \tag{4.87}$$

Ceci assure en particulier que le schéma numérique ne crée pas d'entropie au cours du temps.

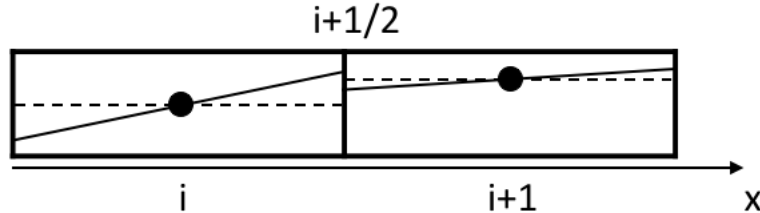


FIGURE 4.17 – Schéma présentant un exemple de configuration de reconstruction MUSCL en 1D à l'origine de problème d'oscillation dans le schéma. Les pointillés représentent l'ordre 1 tandis que les lignes illustrent la reconstruction MUSCL obtenue. Les points sont les valeurs au centre des cellules.

La Figure 4.17 présente une configuration de reconstruction qui met à mal la propriété TVD du schéma. En effet, la ligne en pointillée montre que l'état de gauche est initialement inférieur à l'état de droite. L'état reconstruit à gauche est en revanche plus élevé que l'état de droite ce qui inverse le sens de la discontinuité et conduit à une erreur de prédiction de la direction du flux lors de la résolution du problème de Riemann. L'incohérence du flux prédit avec la configuration réelle de l'interface engendre l'augmentation de la variation totale des grandeurs conservatives dans le domaine.

Afin de garantir la monotonie du schéma numérique et de rétablir la propriété TVD, Van Leer (1979) propose de limiter la pente $\Delta_i u$ de la fonction d'extrapolation par l'introduction d'une fonction de limitation $\Phi(r)$ dans la reconstruction. L'équation (4.84) devient

alors :

$$u_{i+1/2} = u_i + \Phi(r)\Delta_i u \quad (4.88)$$

La fonction de limitation $\Phi(r)$ agit comme un senseur qui détecte les configurations où des extrema locaux peuvent se créer et prévient leur apparition via la reconstruction ce qui conduit à une dégradation locale de l'ordre du schéma numérique. Elle dépend du paramètre r qui mesure la régularité de la solution par un rapport de gradients tel que, pour un problème 1D, pour tout volume de contrôle i :

$$r = \frac{u_i - u_{i-1}}{u_{i+1} - u_i} \quad (4.89)$$

Comme discuté par Van Leer (1974), Sweby (1984) ou encore Roe (1986), le schéma numérique est TVD et d'ordre 2 si, et seulement si, la fonction limiteur appartient au domaine défini par la zone grisée dans les diagrammes présentés dans la Figure 4.18. La limite basse de cette zone est donnée par la contrainte de second ordre alors que la limite haute correspond à la contrainte de schéma TVD. Le schéma le plus précis et le moins diffusif est obtenu lorsque les valeurs données par la fonction limiteur sont confondues avec la limite haute de la zone grise. Cette configuration est présentée dans la Figure 4.18 et correspond au limiteur Superbee proposé par Roe (1986). Cette fonction prend la forme suivante :

$$\Phi(r) = \max [0; \min (2r; 1); \min (r; 2)] \quad (4.90)$$

La fonction (4.90) donne donc théoriquement la meilleure configuration possible pour transporter une discontinuité sans la diffuser. Cependant, en pratique les erreurs numériques peuvent permettre l'apparition d'oscillations numériques correspondant à une perte locale de la monotonie du schéma. Pour éviter ce problème, il faut s'éloigner de la limite supérieure de la zone de second ordre TVD. Différentes formulations de la fonction de limitation existent alors. Le schéma le plus stable, mais également le plus diffusif, est obtenu en utilisant la fonction Minmod (Roe 1986) :

$$\Phi(r) = \max [0; \min (1; r)] \quad (4.91)$$

En pratique, des limiteurs moins diffusifs tels que celui de Koren (1993), Van Leer (1974) ou Sweby (1984) sont préférés. Le limiteur de Koren (1993) est défini par la formule :

$$\Phi(r) = \max \left[0; \min \left(\frac{1+2r}{3}; 2 \right) \right] \quad (4.92)$$

Celui de Van Leer (1974) est donné par :

$$\Phi(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|} \quad (4.93)$$

Et, celui de Sweby (1984) se formule :

$$\Phi(r) = \max [0; \min (\beta r; 1); \min (r; \beta)] \quad (4.94)$$

Le coefficient β est compris entre 1 et 2. $\beta = 1$ donne une fonction Minmod et $\beta = 2$ une fonction Superbee. Une valeur comprise entre $\beta = 1.5$ et $\beta = 1.8$ permet en général d'obtenir un schéma précis et stable.

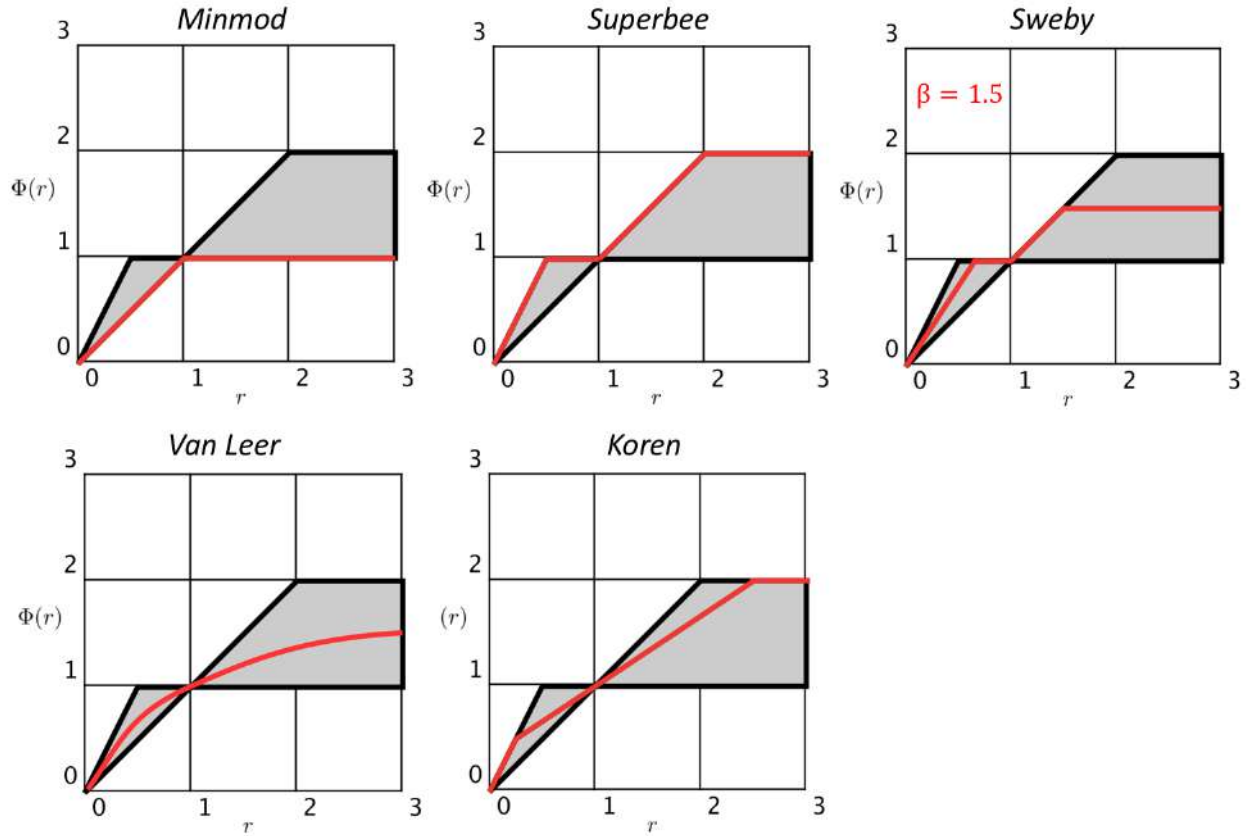


FIGURE 4.18 – Schéma de stabilité de différents limiteurs

4.4.4 Implémentation du schéma de Godunov dans une formulation cell-vertex

Les schémas numériques de Godunov (1959) sont généralement implémentés dans des codes de simulation utilisant une formulation "Cell-centered". Comme expliqué dans la partie 1.6.5, cette formulation propose d'estimer les flux à travers les faces des cellules puis, de mettre à jour et de stocker le vecteur des variables conservatives U au centre de celle-ci. Le code AVBP a, quant à lui, été développé pour des schémas numériques basés sur une architecture dite "cell-vertex" : les contributions sont calculées au centre des cellules puis, sont ramenées aux noeuds où le vecteur des variables conservatives U est mis à jour et stocké. Ce type de structure permet d'assurer une bonne stabilité pour des méthodes numériques classiquement utilisées comme Lax-Wendroff (Lax & Wendroff 1960) ou TTGC (Colin & Rudgyard 2000). Elle est, en revanche, incompatible avec une formulation "cell center". Ceci a conduit à centrer un schéma numérique de Godunov sur les noeuds du maillage (formulation "Node-centered"). Le volume de contrôle correspond alors au volume associé à un noeud du maillage, appelée volume dual V_D (par opposition au volume primaire V_C relatif au volume d'une cellule). La résolution du système hyperbolique d'équations (4.54) via l'approche discrète de Godunov (1959) (eq. (4.58)) se formule alors de la façon suivante :

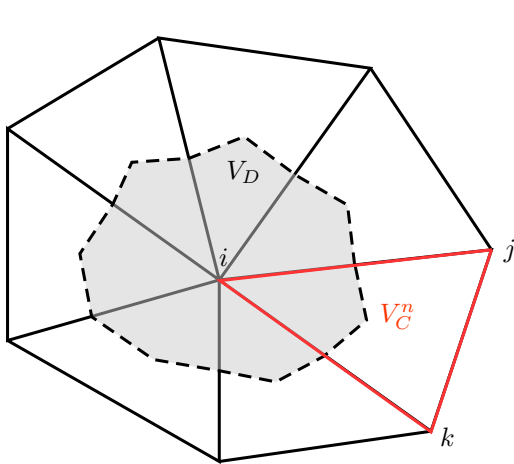
$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{1}{V_D} \sum_{f=1}^{N_f} F_f \cdot \vec{n}_f^D S_f^D = 0 \quad (4.95)$$

où le flux F_f des variables conservatives est estimé à l'aide d'un solveur de Riemann à travers les N_f arêtes (ou face en 3D), de normales \vec{n}_f^D et de longueurs (ou surfaces en 3D) S_f^D , constituant la frontière du volume de contrôle V_D .

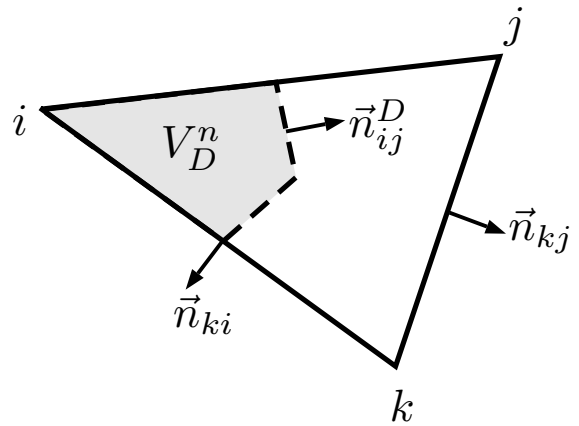
L'adaptation du schéma numérique de Godunov (1959) à une formulation "Node-centered" a fait l'objet de nombreuses études de l'INRIA, comme par exemple Stoufflet et al. (1987), Debiez (1996), Debiez et al. (1998), Debiez & Dervieux (2000), Cournède et al. (2006), Alauzet & Loseille (2010), ainsi que d'une implémentation dans le code AVIP du CERFACS par Joncquière (2019) pour traiter des problèmes mono-espèce liés à la physique du plasma. Ces travaux constituent le ciment des implémentations réalisées dans le code AVBP. Une partie des développements réalisés par Joncquière (2019) a notamment été transposée dans le code AVBP puis, les algorithmes ont été refondus et corrigés et, le solveur a été étendu au traitement de cas multi-espèces et à l'utilisation d'une thermodynamique NASG. La suite de cette section explicite le fonctionnement du schéma numérique de Godunov (1959) implémenté dans le code AVBP au cours de cette thèse.

Expression des métriques liées au maillage dual

Il existe une variété de façons de construire le volume dual et, le lecteur intéressé pourra par exemple se référer aux travaux de Barth (1995), Mishev (2001) et Viozat et al. (2001) qui explicitent différentes méthodes ainsi que leurs impacts sur la précision du schéma numérique. L'approche utilisée dans cette thèse, appelée méthode de la cellule médiane ("median cell"), est l'une des plus classiques. Elle propose de définir les limites d'un volume dual relatif à un noeud par les droites (les plans en 3D) qui passent par le milieu des arêtes (des faces en 3D) et le centre des cellules environnant ce noeud. La Figure 4.19a illustre la situation dans un contexte 2D avec des cellules triangulaires. La contribution V_D^n du volume V_C^n d'une cellule n au volume



(a) Définition du volume dual V_D au noeud i .



(b) Définition d'une normale \vec{n}_{ij}^D à l'une des faces du volume dual à partir des normales aux faces de la cellule.

FIGURE 4.19 – Définition du volume dual et des normales au face associées pour un maillage constitué de triangles.

dual relatif à un de ses sommets s'exprime alors simplement par une division de ce dernier par le nombre de sommet n_v . En considérant un noeud appartenant à N cellules, son volume dual

V_D s'exprime alors :

$$V_D = \sum_{n=1}^N V_D^n = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n_v^n} V_C^n \quad (4.96)$$

Le schéma de Godunov (eq. (4.95)) nécessite également la connaissance des normales et des longueurs des arêtes (aires des faces en 3D) du volume dual afin de calculer le flux à travers chacune d'elles. Soit la cellule triangulaire de la Figure 4.19b formée par les sommets i , j et k , les vecteurs \vec{n}_{ki} et \vec{n}_{kj} sont définis comme les normales aux arêtes reliant respectivement les sommets k et i et, k et j dont les normes correspondent aux longueurs de ses arêtes. La normale \vec{n}_{ij}^D s'exprime alors (Auffray 2014) :

$$\vec{n}_{ij}^D = \frac{1}{6} (\vec{n}_{kj} - \vec{n}_{ki}) \quad (4.97)$$

La longueur de l'arête S_{ij}^D (l'aire de la face en 3D) est donnée par la norme du vecteur \vec{n}_{ij}^D :

$$S_{ij}^D = \|\vec{n}_{ij}^D\| \quad (4.98)$$

Il convient de noter que la formule (4.97) dépend du type d'élément considéré. La Figure 4.20 donne les expressions à utiliser dans les cellules de forme quadrilatère ou tétraédrique. La démonstration de ces expressions est disponibles dans Auffray (2014).

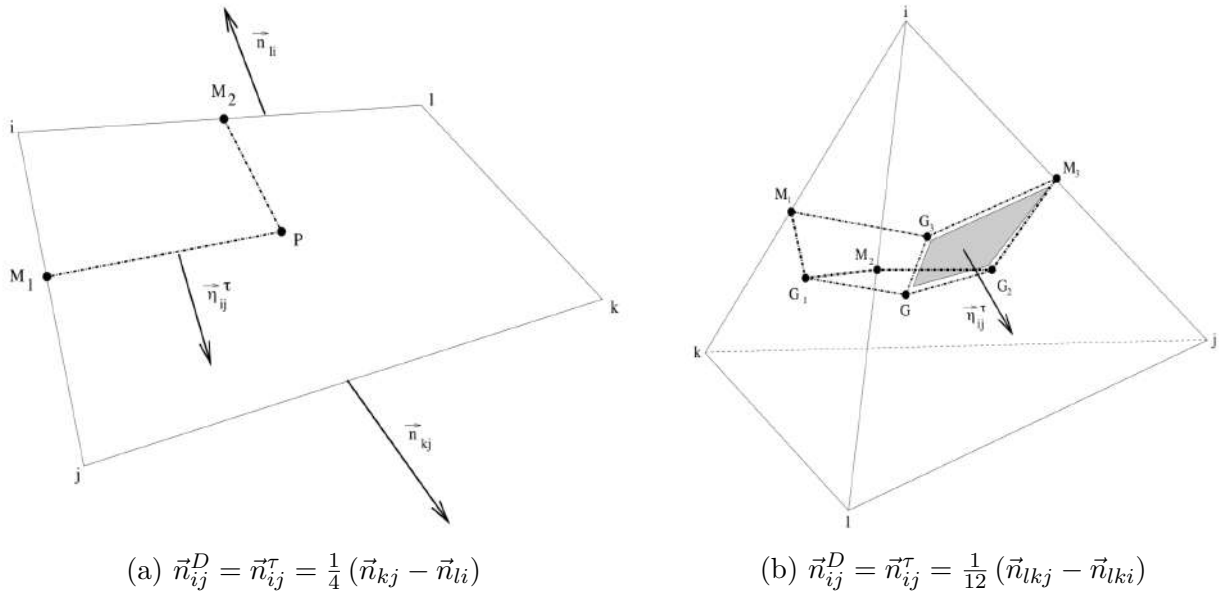


FIGURE 4.20 – Définition d'une normale \vec{n}_{ij}^D à l'une des faces des volumes duaux à partir des normales aux faces des cellules pour des éléments de forme quadrilatères ou tétraédriques.

Estimation du flux

L'estimation du flux qui traverse les arêtes (ou face en 3D) du volume dual est réalisée en résolvant des problèmes de Riemann. Chaque arête (ou face en 3D) est alors considérée comme une interface entre deux états discontinus et le solveur de Riemann de type HLLC, décrit dans la partie 4.4.2, est utilisé pour calculer le flux qui la traverse. L'estimation des

états à gauche et à droite de l'arête (ou face en 3D) donne l'ordre du schéma. En effet, comme expliqué dans la partie 4.4.3, l'approche la plus simple consiste à considérer un état homogène dans chaque volume dual et ainsi à approximer l'état de chaque côté de l'arête (ou face en 3D) par la valeur du vecteur des variables conservatives U au noeud le plus proche. Bien que robuste, cette approche fournit un schéma à l'ordre 1 ce qui donne des résultats trop diffusifs pour être utilisés dans des calculs pratiques. Une méthode MUSCL a donc été implémentée afin d'augmenter la précision spatiale du schéma jusqu'à l'ordre 2.

L'approche mise en place se base sur les travaux de l'INRIA mentionnés précédemment qui développent une méthode adaptée aux formulations "Node-centered". Comme dans les méthodes classiques (voir la partie 4.4.3), les grandeurs sont extrapolées linéairement pour permettre une meilleure estimation de leurs valeurs au niveau de l'interface. Pour assurer une meilleure stabilité du schéma numérique, cette étape d'extrapolation est réalisée sur le vecteur des variables primitives W puis le vecteur des variables conservatives U est recalculé à partir de ces valeurs. En considérant la configuration de la Figure 4.21, les valeurs primitives reconstruites à gauche

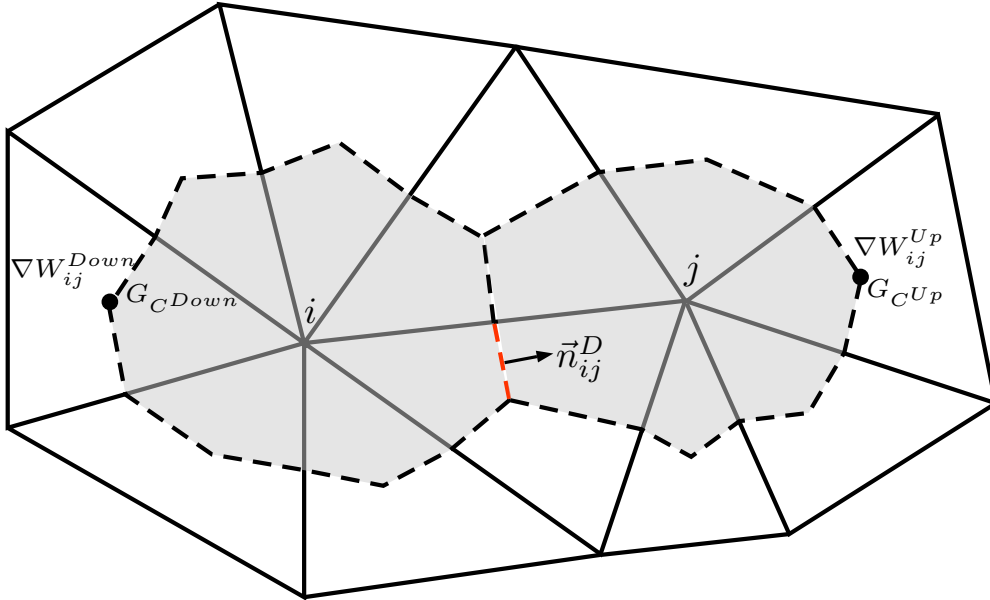


FIGURE 4.21 – Exemple de configuration considérée sur un maillage triangle pour l'estimation du flux à travers la face de normale \vec{n}_{ij}^D . ∇W_{ij}^{Down} et ∇W_{ij}^{Up} représentent les gradients des variables primitives utilisés dans la reconstruction MUSCL. Ils sont calculés aux centres de gravité G_C^{Down} et G_C^{Up} des cellules amont et aval.

W_{ij} et à droite W_{ji} de l'interface de normale \vec{n}_{ij}^D (en rouge) s'écrivent :

$$W_{ij} = W_i + \frac{1}{2}\Phi(r_i)\nabla W_{ij}^{Center} \vec{i} \vec{j} \quad (4.99)$$

$$W_{ji} = W_j + \frac{1}{2}\Phi(r_j)\nabla W_{ji}^{Center} \vec{j} \vec{i} \quad (4.100)$$

où W_i et W_j sont les vecteurs des variables primitives aux points i et j . Les vecteurs $\vec{i} \vec{j}$ et $\vec{j} \vec{i}$ sont définis à partir des coordonnées des points i et j . Les gradients centrés ∇W_{ij}^{Center} et

∇W_{ji}^{Center} sont donnés par les relations suivantes :

$$\nabla W_{ij}^{Center} \vec{i}_j = W_j - W_i \quad (4.101)$$

$$\nabla W_{ji}^{Center} \vec{j}_i = W_i - W_j \quad (4.102)$$

Le symbole Φ représente la fonction limiteur de flux. La formulation utilisée est tirée des travaux de Debiez & Dervieux (2000), Cournède et al. (2006) et Alauzet & Loseille (2010). Elle se base sur les rapports de gradients r_i et r_j .

$$r_i = \frac{\nabla W_{ij}^{Down}}{\nabla W_{ij}^{Center}} \quad (4.103)$$

$$r_j = \frac{\nabla W_{ji}^{Up}}{\nabla W_{ji}^{Center}} \quad (4.104)$$

où ∇W^{Down} et ∇W^{Up} sont respectivement les gradients aux centres de gravité G_{CDown} et G_{CUp} des cellules amonts et aval de l'interface. Ces cellules sont prédéterminées à l'initialisation du calcul pour chaque paire de noeuds par une procédure de minimisation du produit scalaire entre les vecteurs \vec{i}_j et $i\vec{G}_{CDown}$ pour la cellule amont et, \vec{j}_i et $j\vec{G}_{CDown}$ pour la cellule aval. La valeur de la fonction $\Phi(r)$ est donnée par la formule suivante :

Si $\nabla W^{Center} \cdot \nabla W^{Down/Up} \leq 0$ alors :

$$\Phi(r) = 0 \quad (4.105)$$

Sinon :

$$\Phi(r) = \min(\beta, \beta r, (1 - \alpha) + \alpha r)$$

où α et β sont des coefficients libres du limiteur. La courbe de réponse du limiteur $\Phi(r)$ en fonction du paramètre r est présentée en Figure 4.22. Elle permet de caractériser ce limiteur et de discuter de l'influence des coefficients α et β . Il convient d'observer que ces deux coefficients agissent sur la diffusion et la stabilité du schéma numérique. Ce dernier est stable et d'ordre 2 si, et seulement si, $\alpha = [0, 1]$ et $\beta = [1, 2]$. En pratique, le paramètre α est fixé à $\alpha = 1/3$. Cette valeur est utilisée dans de multiples études sur des limiteurs similaires comme par exemple Koren (1993), Debiez & Dervieux (2000) et Alauzet & Loseille (2010). Elle garantit la meilleure précision possible en offrant un bon compromis entre les erreurs de dispersion et de dissipation (Carpentier 1998). Le coefficient β peut quant à lui être assimilé au paramètre d'un limiteur de type Sweby. La valeur $\beta = 1$ donne le schéma le plus stable mais aussi le plus diffusif, tandis que la valeur $\beta = 2$ permet d'obtenir la solution la plus précise mais aussi la plus sujette à l'apparition d'instabilités numériques. En pratique, il a été observé qu'une valeur de β comprise entre $\beta = 1.5$ et $\beta = 1.8$ offre un bon compromis entre précision et stabilité sur des cas 2D tandis que la valeur $\beta = 2$ ne semble quasiment utilisable que sur des cas 1D. Il convient de noter que le coefficient β n'apparaît pas dans la version originale du limiteur proposée par Cournède et al. (2006) mais il est possible de montrer que sa formulation revient à imposer $\beta = 2$ dans le limiteur de l'équation (4.105). Pour finir, il convient de remarquer que le terme $\Phi(r)\nabla W^C$ dans les équations (4.99) et (4.100) peut directement s'écrire sous la forme d'un gradient limité $\nabla W^{lim} = \Phi(r)\nabla W^C$ en intégrant le gradient ∇W^C dans la formulation du limiteur de flux. L'équation (4.105) devient alors :

Si $\nabla W^C \cdot \nabla W^{Down/Up} \leq 0$ alors :

$$\nabla W^{lim} = 0$$

Sinon :

$$\nabla W^{lim} = \text{sign}(u) \min(\beta|u|, \beta|v|, |(1 - \alpha)u + \alpha v|)$$

(4.106)

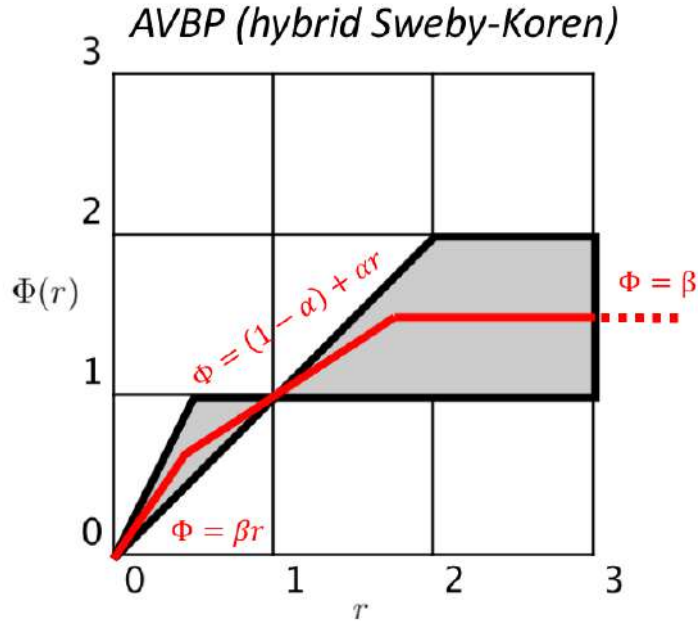


FIGURE 4.22 – Schéma de stabilité du limiteur implémenté dans AVBP

avec, $u = \nabla W^C$ et $v = \nabla W^{Down/Up}$. Cette formulation sous la forme d'un gradient limité est, par exemple, préférée dans les travaux de Debiez & Dervieux (2000), Cournède et al. (2006) et Alauzet & Loseille (2010). Elle est cependant strictement équivalente à l'équation (4.105) et l'une ou l'autre de ces relations peut être utilisée pour limiter le flux.

Implémentation du schéma de Godunov dans le code AVBP

L'algorithme utilisé pour calculer la somme des flux dans chaque volume de contrôle constitue un enjeu important pour garantir une implémentation simple et efficace du schéma numérique dans le code AVBP. La façon la plus intuitive de procéder serait de boucler sur chaque volume de contrôle puis, de calculer consécutivement les flux qui traversent ses interfaces. Cependant, la structure du code AVBP permet une implémentation plus performante en bouclant plutôt sur les cellules du maillage. De cette manière, les flux à travers les faces des volumes duaux contenues dans chaque cellule sont directement calculés à partir des valeurs aux sommets de la cellule. Cette méthodologie réduit le nombre d'opérations nécessaires par rapport à une boucle sur les noeuds du maillage puisque le flux à travers une face appartenant à deux volumes duaux n'est calculé qu'une seule fois. Ainsi, en considérant la cellule triangulaire en Figure 4.23, le flux à travers la face de normal \vec{n}_{ij}^D est tout d'abord calculé à l'aide du solveur de Riemann HLLC. A l'ordre 1, les valeurs U_i et U_j des variables conservatives aux sommets i et j sont directement utilisées dans le solveur de Riemann. A l'ordre 2, les valeurs des variables conservatives de chaque côté de la face sont reconstruites via la méthode MUSCL détaillée dans la section 4.4.4, et, sont utilisées dans le solveur de Riemann HLLC pour déterminer le flux. Les contributions de ce flux pour les volumes duaux V_D^i et V_D^j sont ensuite calculées et stockées respectivement aux noeuds i et j . Cette méthodologie est successivement utilisée pour la face de normale \vec{n}_{jk}^D puis, \vec{n}_{ki}^D . Le traitement de toutes les cellules du maillage par cette procédure permet in fine de récupérer en chaque noeud du maillage les contributions des différentes faces à la

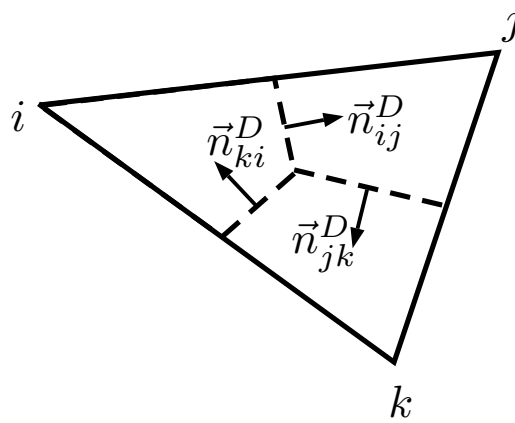


FIGURE 4.23 – Normales aux différentes faces des volumes duaux contenus dans une cellule triangulaire.

somme des flux. Il convient toutefois de remarquer que les flux à travers les faces de conditions aux limites ne sont pas calculés pour les volumes duaux situés au bord du domaine. En effet, comme illustré par la Figure 4.24 dans le cas d'un maillage constitué de triangles, l'algorithme, bouclant sur les paires de noeuds, est bien capable de déterminer les flux à travers les faces dans le domaine (en pointillé) mais pas à travers les faces de normales \vec{n}_{ji}^F et \vec{n}_{ik}^F . Les contributions de ces deux faces à la somme des flux au noeud i doivent donc être calculées pour fermer le volume de contrôle.

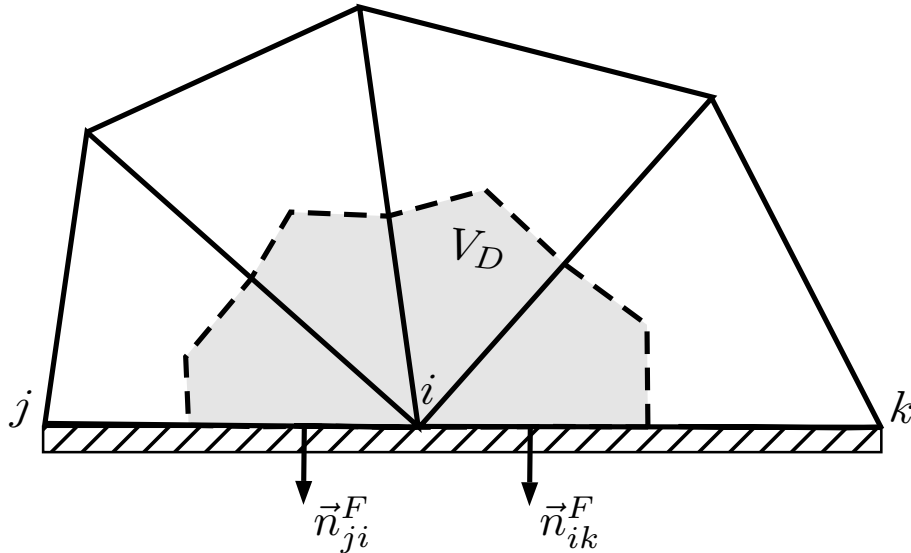


FIGURE 4.24 – Volume dual au bord du domaine dans le cas d'un maillage triangle.

Plusieurs méthodes de fermeture des volumes de contrôle aux conditions aux limites ont été envisagées durant cette thèse. La première, et la plus intuitive, consiste à considérer un état fantôme correspondant à ce qui doit être imposé au niveau de la condition aux limites puis, de calculer le flux résultant de la résolution d'un problème de Riemann entre l'état au noeud (i dans la Figure 4.24) et l'état fantôme. Bien que cette solution soit élégante et numériquement

cohérente, l'implémentation réalisée durant cette thèse n'a pas permis d'obtenir des conditions aux limites numériquement stables. Toutefois, il n'a pas été possible de conclure si cette instabilité était liée à l'implémentation ou à la méthode en elle-même. Des travaux plus poussés devront donc être exécutés dans le futur. La deuxième fermeture envisagée s'articule selon trois temps. Le flux à travers la face de condition aux limites est, tout d'abord, calculé en considérant que l'état de l'autre côté de l'interface est similaire à l'état au noeud à l'itération courante. Les variables conservatives sont, ensuite, avancées temporellement donnant un état prédit. L'état prédit est, finalement, corrigé pour tenir compte de la condition aux limites. Cette méthode a l'avantage d'être consistante avec la formulation des conditions aux limites aux noeuds utilisée avec les autres schémas numériques disponibles dans le code AVBP ce qui a facilité son intégration dans le code. Elle permet également d'imposer la valeur souhaitée en condition aux limites soit en dur, soit via une méthode de relaxation de type NSCBC (Poinsot & Lele 1992). Bien que celle-ci soit utilisée dans les calculs de cette thèse, il convient de noter que l'hypothèse de fermeture du volume de contrôle peut générer du bruit numérique au niveau des conditions aux limites. Même si ce bruit reste faible dans la plupart des configurations, il peut devenir très important, contaminer l'intérieur du domaine et, finalement, déstabiliser le schéma numérique en présence de très forts gradients proches des conditions aux limites. Cette méthode est donc une solution temporaire et d'importants travaux de robustisation des conditions aux limites devront être conduits à la suite de cette thèse.

Intégration temporelle du système d'équations

L'intégration temporelle du système d'équations (4.95) est réalisée à l'aide d'un schéma numérique de Runge-Kutta à faible stockage. Ce type de schéma, implémenté dans le code AVBP par Lamarque (2007), se base sur une approche itérative explicite où chaque état intermédiaire permet d'approcher la solution. L'ordre de convergence du schéma dépendant du nombre d'états intermédiaires calculés. Ainsi, trois itérations permettent d'obtenir un schéma d'ordre deux tandis qu'il faut dix itérations pour atteindre le quatrième ordre. Le schéma numérique de Runge-Kutta à faible stockage utilisé pour les calculs comporte trois étapes (ordre 2). Il se formule de la manière suivante :

$$U^{n,(0)} = U^n \tag{4.107a}$$

$$U^{n,(1)} = U^{n,(0)} - \alpha_1 \Delta t \left[\frac{1}{V_D} \sum_{f=1}^{N_f} F_f \cdot \vec{n}_f^D S_f^D \right]^{n,(0)} \tag{4.107b}$$

$$U^{n,(2)} = U^{n,(1)} - \alpha_2 \Delta t \left[\frac{1}{V_D} \sum_{f=1}^{N_f} F_f \cdot \vec{n}_f^D S_f^D \right]^{n,(1)} \tag{4.107c}$$

$$U^{(n+1)} = U^{n,(2)} - \alpha_3 \Delta t \left[\frac{1}{V_D} \sum_{f=1}^{N_f} F_f \cdot \vec{n}_f^D S_f^D \right]^{n,(2)} \tag{4.107d}$$

α_1 , α_2 et α_3 sont des coefficients de la méthode. Ils sont définis pour garantir la stabilité et la précision du schéma et valent (Lamarque 2007) :

$$\alpha_1 = \frac{1}{3} \quad (4.108)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2} \quad (4.109)$$

$$\alpha_3 = 1 \quad (4.110)$$

La notion de faible stockage vient du fait que le jeu d'équations (4.107) ne nécessite pas le stockage de tous les états intermédiaires comme c'est le cas des schémas classiques de Runge-Kutta. En effet, seul le stockage du dernier état intermédiaire suffit pour calculer l'état intermédiaire suivant ce qui permet de réduire au minimum le coût en mémoire du schéma.

La stabilité de ce type de schéma numérique est soumise à une limitation du pas de temps dans la simulation donnée par une restriction en CFL (eq. (4.43)). La limite de stabilité est théoriquement obtenue pour la condition $CFL = 1$. Il convient cependant de remarquer que l'ajout de termes de diffusion peut conduire à une restriction plus importante du pas de temps par un nombre de Fourier Fo :

$$Fo = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \quad (4.111)$$

où Δx est le pas d'espace et, $D = \max_{k=1,N} D_k$ correspond au coefficient diffusion de l'espèce qui diffuse le plus parmi les N espèces présentes dans le calcul. L'expression des coefficients D_k sera discuté dans la partie 4.6. Dans les calculs de cette thèse où la diffusion des espèces est considérée, le nombre de Fourier est fixé à $Fo = 0.1$.

Stabilisation du schéma numérique - La méthode LAD

La raideur des gradients liée à la présence d'une interface liquide/gaz dans les cas diphasiques met ponctuellement en échec le limiteur de flux pour prévenir l'apparition d'oscillations dues au schéma numérique. Ces oscillations se manifestent principalement dans des cas multi-dimensionnels et engendrent l'apparition de pics de pression qui déstabilisent le calcul. La stratégie de limitation du flux est donc complétée par l'ajout d'une procédure de diffusion artificielle localisée ("Localized Artificial Diffusion" - LAD) pour garantir la stabilité numérique des calculs. La méthodologie est assimilable à une augmentation locale et artificielle de viscosité. Elle a été proposée par T. Schmitt et, est inspirée de l'approche développée dans Schmitt (2020) qui utilise un filtrage d'ordre élevé pour détecter l'apparition de hautes fréquences dans l'écoulement. Le senseur de viscosité artificielle est, toutefois, construit à partir de la pression P au lieu de la masse volumique ρ .

$$S_P = \frac{(\|\vec{u}\| + c) \Delta t}{\Delta x} \left| \frac{\hat{P} - P}{0.01P} \right| \quad (4.112)$$

où Δt est le pas de temps, Δx est la taille caractéristique des cellules, $\|\vec{u}\|$ est la norme du vecteur vitesse, c est la vitesse du son et, $\hat{P} = F * P$ indique un filtrage spatiale de la pression P . F est un filtre spatial récursif présenté par Mathew et al. (2003) et issu d'une extension de la méthode de déconvolution de Stolz & Adam (1999). Le filtre selectif explicite F y est construit à partir d'un filtre de référence G et de l'approximation Q de sa déconvolution :

$$\hat{P} = F * P = Q * G * P = \sum_{n=0}^{N_{filt}} (I - G)^n * G * P \quad (4.113)$$

où I est l'opérateur identité et N_{filt} correspond au nombre d'itérations de filtrage. Le filtre G est approximé à l'aide d'une dérivée d'ordre 4. Son expression à un noeud i du maillage est donnée par l'expression :

$$(G * P)_i = P_i + \frac{1}{V_D^i} \sum_{j=1}^N \frac{V_C^j}{n_v^j} [(\nabla P)_j^C \cdot (\vec{x}_j^C - \vec{x}_i) - (P_j^C - P_i)] \quad (4.114)$$

où V_D^i est le volume dual du noeud i et V_C^j fait référence au volume de la cellule j appartenant aux N cellules connectées au noeud i . \vec{x}_i correspond au vecteur position du noeud i . \vec{x}_j^C , P_j^C et $(\nabla P)_j^C$ sont respectivement le vecteur position, la pression et le gradient de la pression au centre de la cellule j . Ces valeurs correspondent à la valeur moyenne entre les n_v^j sommets de la cellule j . Appliquée à une variable ϕ appartenant à une cellule j , cette opération s'écrit :

$$\phi_j^C = \frac{1}{n_v^j} \sum_{k \in j} \phi_k \quad (4.115)$$

La Figure 4.25 donne la réponse du filtre F en fonction en fonction de la longueur d'onde normalisée et du nombre d'itérations de filtrage N_{filt} . Comme pour TTGC, l'utilisation d'une seule itération de filtrage $N_{filt} = 1$ suffit en pratique pour stabiliser les calculs.

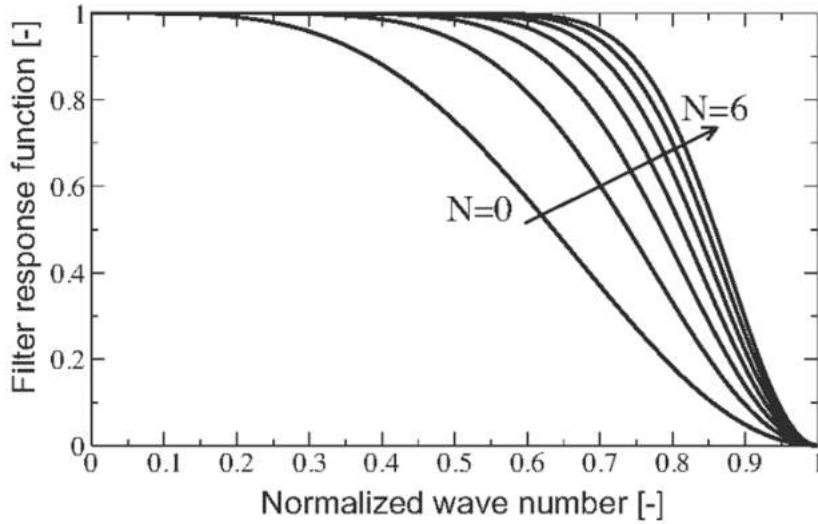


FIGURE 4.25 – Réponse du filtre F en fonction de la longueur d'onde normalisée et du nombre d'itérations de filtrage $N = N_{filt}$. La figure est tirée de Schmitt (2020).

Le senser S_P est calculé à la fin de chaque itération temporelle après le calcul des termes de convection, de diffusion ainsi que des différents termes sources mais avant l'application des conditions aux limites. Les variables conservatives sont ensuite diffusées artificiellement à l'aide d'un opérateur de second ordre permettant de lisser les gradients. Au noeud i , les variables conservatives artificiellement diffusées U_i^{AD} sont obtenues par l'opération suivante :

$$U_i^{AD} = U_i + \frac{1}{V_{D,i}} \sum_{j=1}^N -\frac{V_C^j}{n_v^j} (U_j^C - U_i) C^{AD} S_P^C \quad (4.116)$$

où C^{AD} est un coefficient de diffusion choisi par l'utilisateur. Les valeurs utilisées dans cette thèse s'étalent entre $C^{AD} = 0.5$ et $C^{AD} = 2.0$.

Etat du développement du solveur et améliorations futurs

Les développements réalisés au cours de cette thèse ont permis de doter le code AVBP d'une nouvelle méthode numérique stable en présence de très forts gradients comme ceux rencontrés dans des chocs ou des interfaces liquide/gaz. Basée sur le schéma numérique de Godunov (1959) résolu avec un solveur de Riemann HLLC couplé avec un schéma temporelle de Runge-Kutta à trois étapes, la méthode garantit une résolution au deuxième ordre en temps et au deuxième ordre en espace grâce à l'emploi d'une méthode de reconstruction MUSCL (au premier ordre sinon). Ces implémentations sont validées sur des cas 1D et 2D puis, utilisées dans la suite pour la simulation de cas diphasiques.

A ce stade, il semble intéressant de noter les points d'amélioration de l'algorithme. Tout d'abord, comme évoqué dans la partie 4.4.4, la fermeture actuellement utilisée pour les volumes duaux aux conditions aux limites fait intervenir une approximation qui peut engendrer un bruit numérique dans la solution. Il conviendra donc d'améliorer l'expression du flux de fermeture pour stabiliser et robustiser les conditions aux limites. Ensuite, les performances du solveur en multi-processeurs pourront être améliorées. La gestion des frontières entre les processeurs a déjà fait l'objet d'un important travail de développement algorithmique, permettant notamment de gérer l'échange des gradients calculés au centre des cellules situées de chaque côté de la frontière pour les besoins de la reconstruction MUSCL. L'algorithme développé est présenté dans l'annexe C. Son développement a été particulièrement complexe car ce dernier doit garantir un échange correct des informations entre les processeurs tout en conservant un coût mémoire faible et une vitesse d'exécution rapide. La solution proposée permet actuellement d'assurer les deux premières contraintes. Cependant, comme discuté dans l'annexe C, elle nécessite encore quelques optimisations pour améliorer sa vitesse d'exécution. Un travail devra donc être réalisé en ce sens dans l'avenir. Pour finir, les performances du solveur pourront également être grandement améliorées en adaptant la double décomposition de domaine classiquement utilisée par le code (décomposition du maillage par processeur puis par groupe de cellules) pour permettre son utilisation avec la méthodologie MUSCL.

4.5 Validation du solveur

4.5.1 Validation 1D

Le solveur de Riemann ainsi que les équations d'état NASG sont tout d'abord validés en observant les résultats obtenus sur les cas de tube à choc diphasique sans tension de surface réalisés par Chiapolino et al. (2017). Dans ces cas, le mélange considéré est constitué d'eau liquide, d'eau sous la forme de vapeur et d'air. Les propriétés thermodynamiques des 3 composants sont résumés dans le Tableau 4.2. Les résultats sont comparés à ceux obtenus par Chiapolino et al. (2017) pour le second ordre et par des calculs réalisés avec le code RADIS pour le premier ordre. Le code RADIS (Really Amazing Diffuse Interface Solver) est un code 1D maison spécialement développé en Python orienté objet pour préparer l'intégration de la méthode dans AVBP. Il résout des problèmes 1D aux interfaces diffuses via le modèle à 4 équations (section 4.2.2) sur un maillage cartésien uniforme avec un solveur de Riemann HLLC d'ordre 1 et une fermeture thermodynamique NASG.

Coefficients	Eau liquide	Eau vapeur	Air
C_p (J/kg/K)	4285	1401	1007
C_v (J/kg/K)	3610	955	719
P_∞ (Pa)	7028.10^5	0	0
q (J/kg)	-1177788	2077616	0
q' (J/kg/K)	0	14317	0
b (m ³ /kg)	$6.6.10^{-4}$	0	0
W (g/mol)	18	18	29

TABLE 4.2 – Coefficients NASG pour l’eau et l’air déterminés dans la gamme de températures [273-500 K] par Chiapolino et al. (2017).

Tube à choc avec un mélange principalement constitué de gaz

Un tube à choc avec un saut de pression de 2 bar et une température constante de 293 K est considéré. L’air est fixé comme composant majoritaire du mélange $Y_3 = 0.98$. Les proportions d’eau liquide Y_1 et d’eau vapeur Y_2 sont déterminées pour que le mélange soit à l’équilibre, c’est-à-dire sur la courbe de saturation. Les fractions de masse sont alors $Y_1 \approx 1.073.10^{-2}$ et $Y_2 \approx 9.263.10^{-3}$ à gauche du domaine et $Y_1 = 1.186.10^{-3}$ et $Y_2 = 1.881.10^{-2}$ à droite. Les résultats à $t = 1$ ms de temps physique sont présentés dans les Figures 4.26 (ordre 1) et 4.27 (ordre 2). Ils sont en parfaites concordances avec ceux attendus. La Figure 4.27 montre toutefois que la température au niveau de l’onde de contact est à l’ordre 1 au lieu de l’ordre 2 souhaité. Ce problème est purement lié au limiteur de flux utilisé dans la reconstruction MUSCL du solveur de Riemann. Le limiteur superbee utilisé par Chiapolino et al. (2017) permet d’obtenir une onde de contact plus raide que le limiteur utilisé dans AVBP qui offre une solution légèrement moins raide mais assure une meilleure stabilité du schéma numérique.

Tube à choc avec un mélange principalement constitué d’eau

Un tube à choc avec un mélange principalement constitué d’eau est maintenant considéré. Comme dans le cas précédent, le saut de pression est de 2 bar et la température vaut 293 K dans tout le domaine. La fraction de masse de l’air dans le mélange est fixée à $Y_3 = 10^{-5}$. Les proportions de liquide Y_1 et de vapeur Y_2 déterminées à l’équilibre sont alors $Y_1 = 0.9999899$ et $Y_2 = 9.45.10^{-8}$ à gauche du domaine et $Y_1 = 0.9999898$ et $Y_2 = 1.919.10^{-7}$ à droite. Les résultats à $t = 1.5$ ms de temps physique sont présentés dans les Figures 4.28 (ordre 1) et 4.29 (ordre 2). Les Figures 4.28 et 4.29 illustrent un parfait accord au premier ordre, en comparant au solveur RADIS, comme au second ordre, en regard des résultats obtenus par Chiapolino et al. (2017).

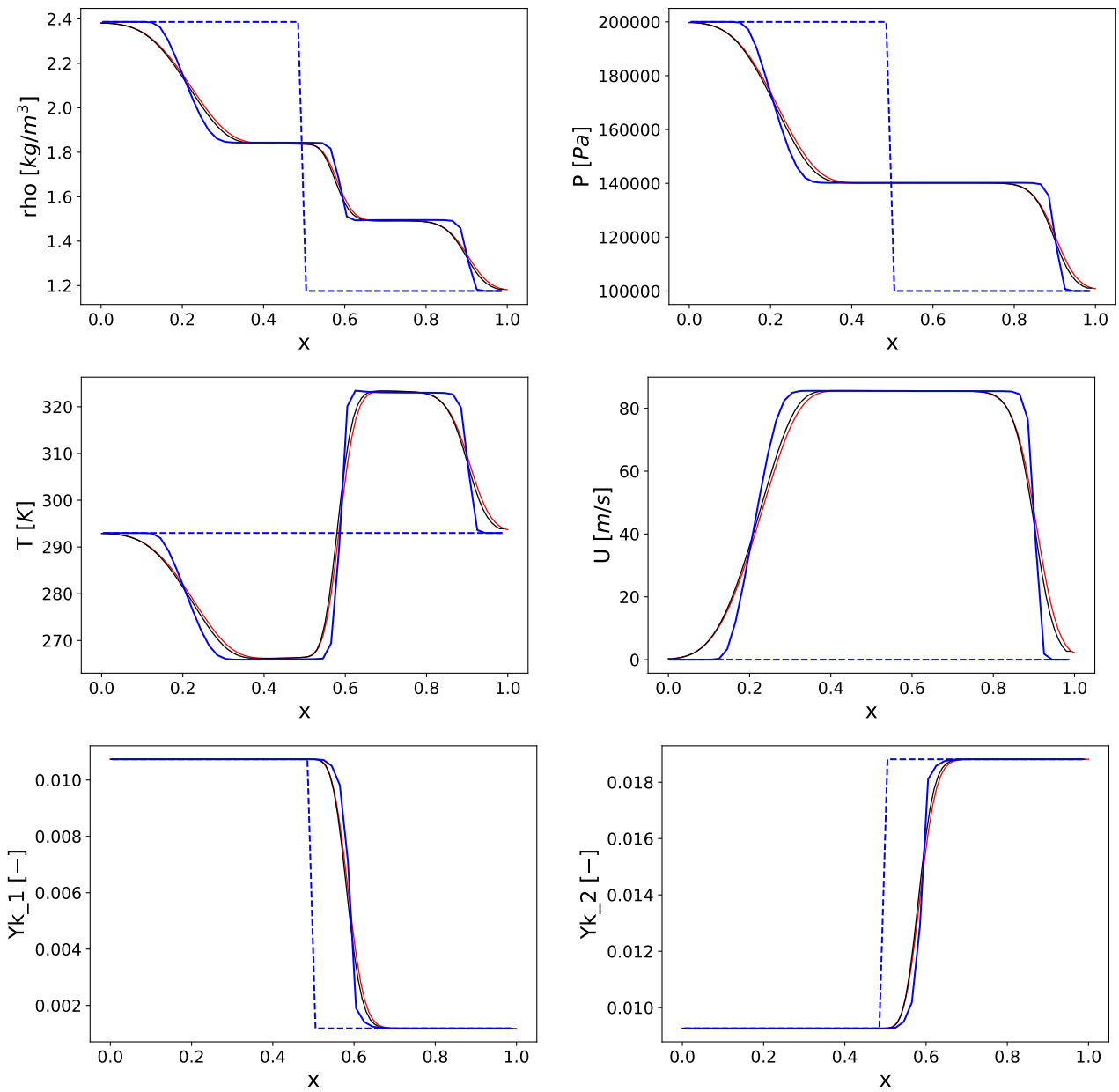


FIGURE 4.26 – Comparaison des résultats obtenus avec le solveur de Riemann HLLC d’AVBP (ligne rouge) avec ceux de Chiapolino (ligne bleu) et de RADIS (ligne noire) pour un cas de tube à choc diphasique avec l’air en proportion majoritaire. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s⁻¹, $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 1.073.10^{-2}$, $Y_{1,r} \approx 1.186.10^{-3}$, $Y_{2,l} \approx 9.263.10^{-3}$, $Y_{2,r} \approx 1.881.10^{-2}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 0.98$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1 ms.

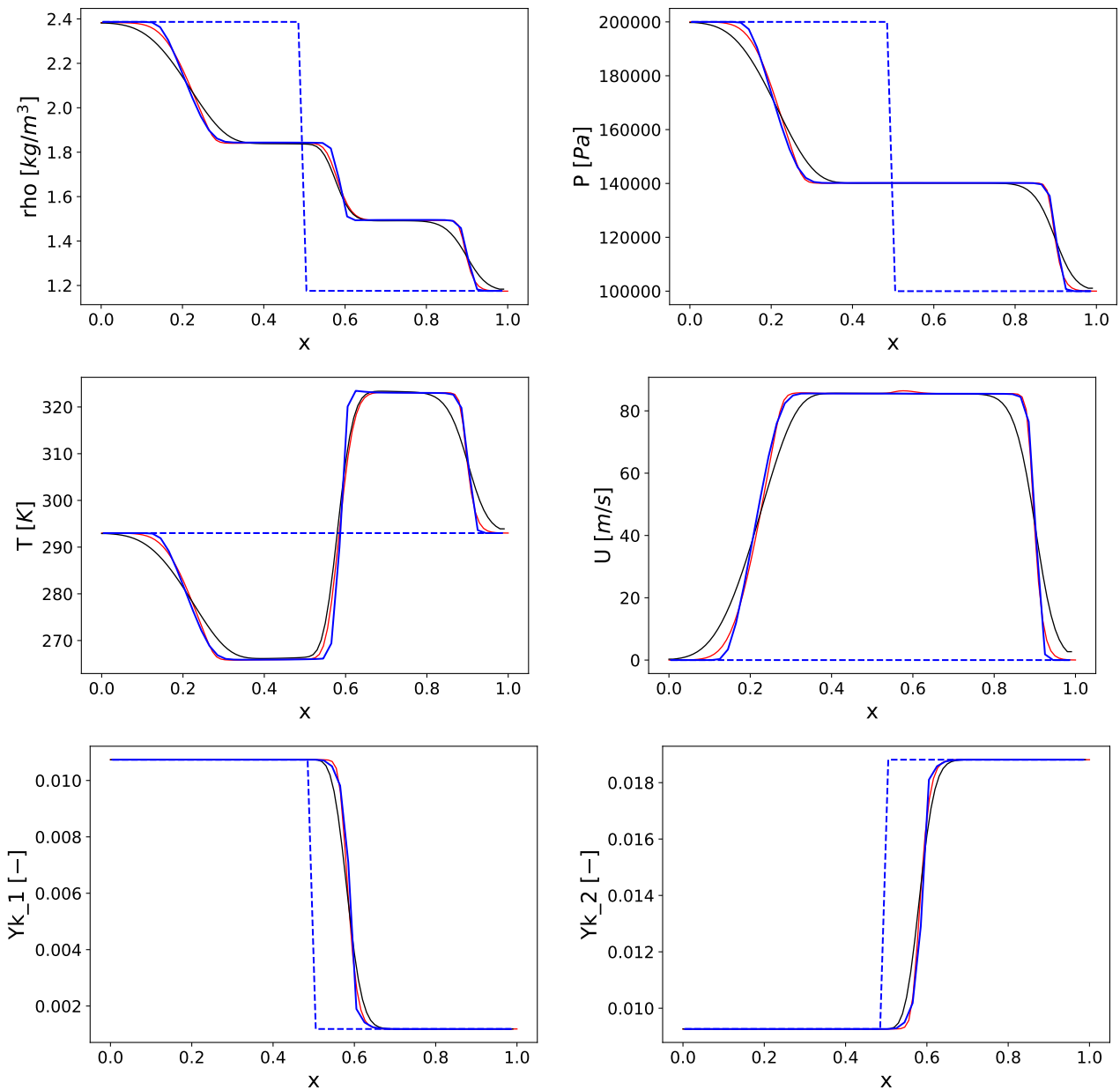


FIGURE 4.27 – Comparaison des résultats obtenus avec le solveur de Riemann HLLC MUSCL d’AVBP (ligne rouge) avec ceux de Chiapolino (ligne bleu) et de RADIS (ligne noire) pour un cas de tube à choc diphasique avec l’air en proportion majoritaire. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s⁻¹, $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 1.073.10^{-2}$, $Y_{1,r} \approx 1.186.10^{-3}$, $Y_{2,l} \approx 9.263.10^{-3}$, $Y_{2,r} \approx 1.881.10^{-2}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 0.98$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1 ms.

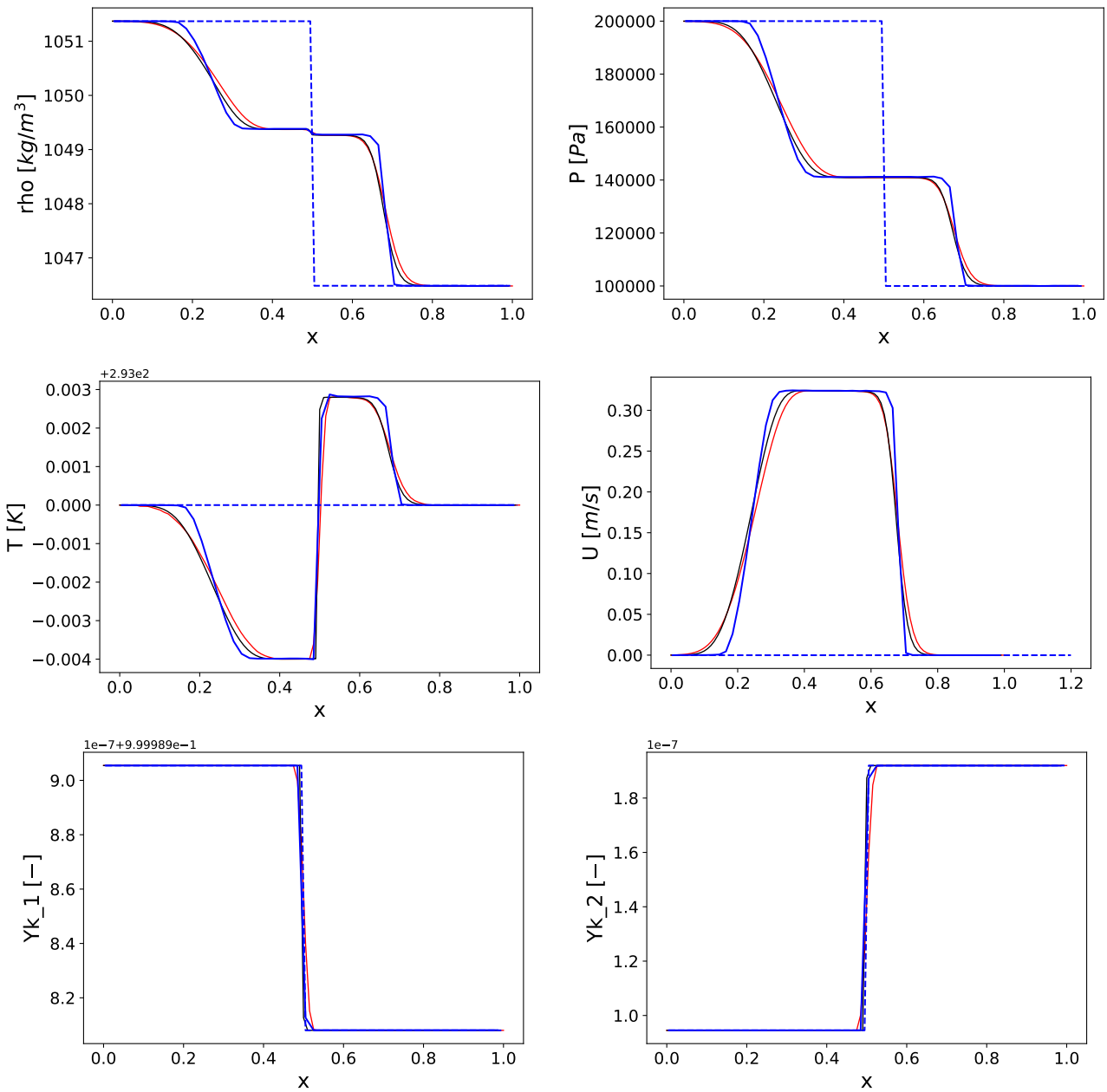


FIGURE 4.28 – Comparaison des résultats obtenus avec le solveur de Riemann HLLC d’AVBP (ligne rouge) avec ceux de Chiapolino (ligne bleu) et de RADIS (ligne noire) pour un cas de tube à choc diphasique avec le liquide en proportion majoritaire. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s⁻¹, $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 0.9999899$, $Y_{1,r} = 0.9999898$, $Y_{2,l} = 9.45.10^{-8}$, $Y_{2,r} = 1.919.10^{-7}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 10^{-5}$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1.5 ms.

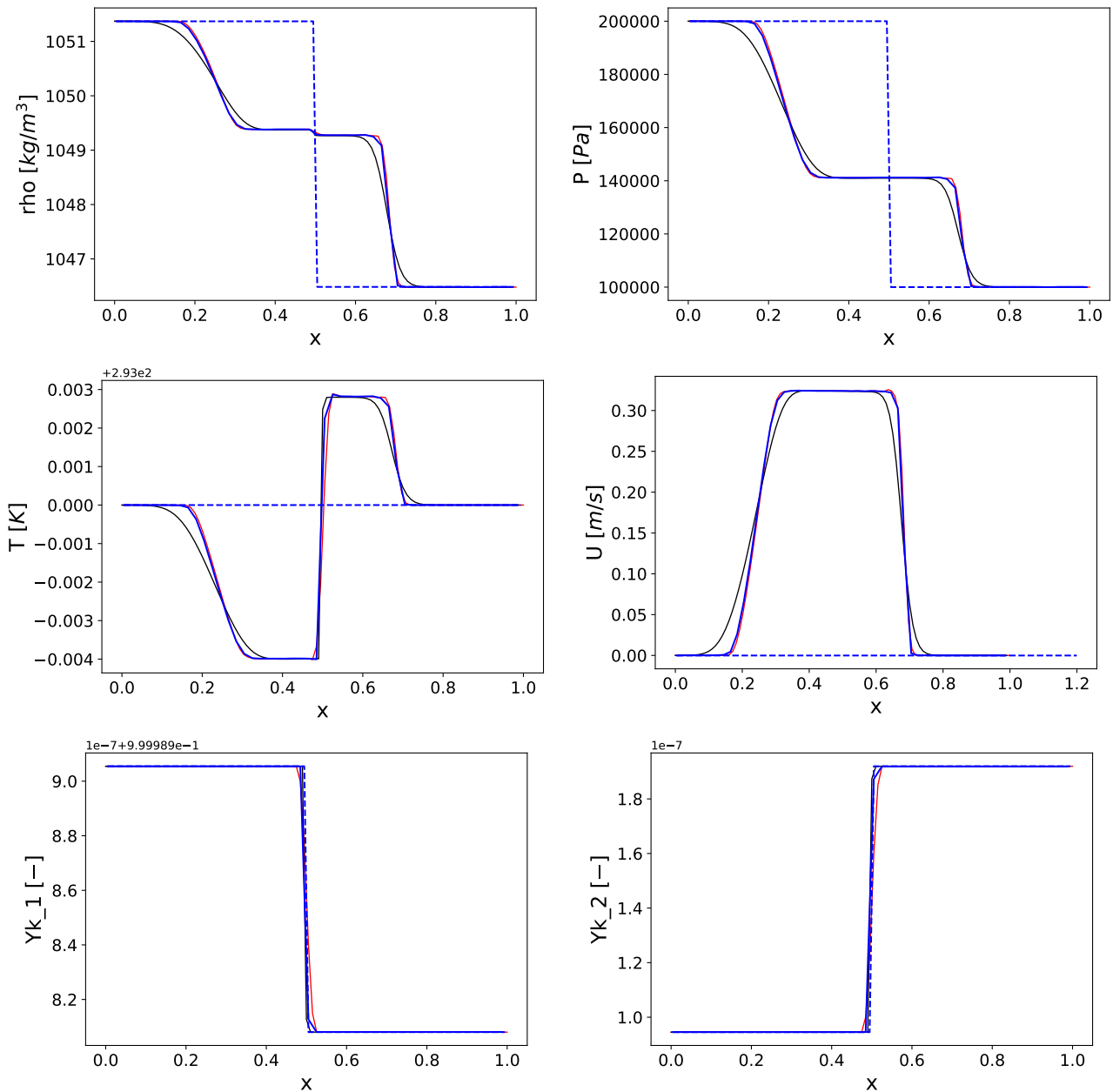


FIGURE 4.29 – Comparaison des résultats obtenus avec le solveur de Riemann HLLC MUSCL d’AVBP (ligne rouge) avec ceux de Chiapolino (ligne bleu) et de RADIS (ligne noire) pour un cas de tube à choc diphasique avec le liquide en proportion majoritaire. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s⁻¹, $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 0.9999899$, $Y_{1,r} = 0.9999898$, $Y_{2,l} = 9.45.10^{-8}$, $Y_{2,r} = 1.919.10^{-7}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 10^{-5}$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1.5 ms.

4.5.2 Validation 2D

Dans cette partie, la méthodologie précédemment décrite est testée sur des cas tests 2D. Dans un premier temps, la capacité du solveur à transporter des discontinuités est vérifiée à travers un cas test de Riemann 2D. Puis, une étude de convergence en maillage sur le transport d'un vortex isentropique est menée afin de caractériser et de vérifier l'ordre de précision du schéma numérique développé avec et sans reconstruction MUSCL.

Cas de Riemann 2D

Notamment proposés et largement étudiés par Zhang & Zheng (1990), Chang et al. (1995), Schulz-Rinne (1993) et Schulz-Rinne et al. (1993), les problèmes de Riemann 2D proposent de diviser un domaine 2D carré en quatre cadrans contenant chacun un état thermodynamique constant et à analyser l'évolution des discontinuités au cours du temps. Le transport de discontinuités dans un contexte multidimensionnel ainsi que l'existence d'interactions entre elles rendent ces cas particulièrement difficiles à simuler numériquement. Ils sont de ce fait classiquement réalisés pour caractériser et comparer des schémas numériques. Lax & Liu (1998) les utilisent, par exemple, pour étudier la positivité de schémas numériques, Kurganov & Tadmor (2002) pour évaluer la robustesse de leur schéma numérique "Riemann-solvers-free central scheme", Dumbser et al. (2014) pour tester un schéma "Discontinuous Galerkin" avec un limiteur de sous-maille ou encore, Deng et al. (2019) pour comparer la diffusion des discontinuités données par leur nouveau solveur HLL-BVD avec celle obtenue à l'aide de solveurs HLL et HLLC.

Le cas proposé dans cette partie est tiré de Kurganov & Tadmor (2002) et Deng et al. (2019). La condition initiale du problème est un domaine 2D carré de dimensions $[-0.5, -0.5] \times [0.5, 0.5]$ divisé en quatre zones. La configuration de ces zones est définie comme suit :

$$(\rho_0, u_0, v_0, P_0) = \begin{cases} (2.0, 0.75, 0.5, 1.0), & x \leq 0.0, y \geq 0.0 \\ (1.0, -0.75, 0.5, 1.0), & x < 0.0, y < 0.0 \\ (1.0, 0.75, -0.5, 1.0), & x > 0.0, y > 0.0 \\ (3.0, -0.75, -0.5, 1.0), & x > 0.0, y < 0.0 \end{cases} \quad (4.117)$$

Les calculs sont réalisés sur quatre maillages cartésiens uniformes de 100×100 , 400×400 , 600×600 et 1000×1000 cellules. Le rapport des capacités calorifiques est maintenue à une valeur constante $\gamma = 1.4$ tout au long de la simulation. Le pas de temps est piloté par la condition $CFL = 0.4$. Les conditions aux limites sont purement non-refléchissantes. Une zone tampon est également ajoutée entre les conditions aux limites et la zone d'intérêt afin d'éviter toute interaction entre elles. Les calculs sont réalisés avec le solveur HLLC incluant une reconstruction MUSCL. Le paramètre du limiteur est fixé à $\beta = 1.5$. Le schéma numérique est stabilisé à l'aide de la stratégie LAD présentée dans la partie 4.4.4. Son coefficient de diffusion vaut $C^{AD} = 2$.

La Figure 4.30 montre les résultats obtenus au temps $\tau = 0.3$ pour les différents maillages ainsi que par Deng et al. (2019) en utilisant un solveur HLLC sur un maillage de 600×600 cellules. La structure de la solution, en forme d'un tourbillon qui s'enroule autour du centre dans le sens des aiguilles d'une montre, est en très bon accord les résultats de Deng et al. (2019). Les petites structures, et notamment les petites ondulations des isocontours de masse volumique dans les cadrans en bas à gauche et en haut à droite, sont également bien reproduites quelque soit le maillage. Il est, de surcroît, intéressant de constater que la résolution du maillage constitué de 1000×1000 cellules permet l'apparition de petites structures au niveau des discontinuités.

Ces structures sont bien connus dans la littérature. Elles sont, par exemple, observées dans l'étude de Dumbser et al. (2014). Elles sont engendrées par le développement d'instabilités de Kelvin-Helmholtz dû au cisaillement du fluide au niveau des discontinuités.

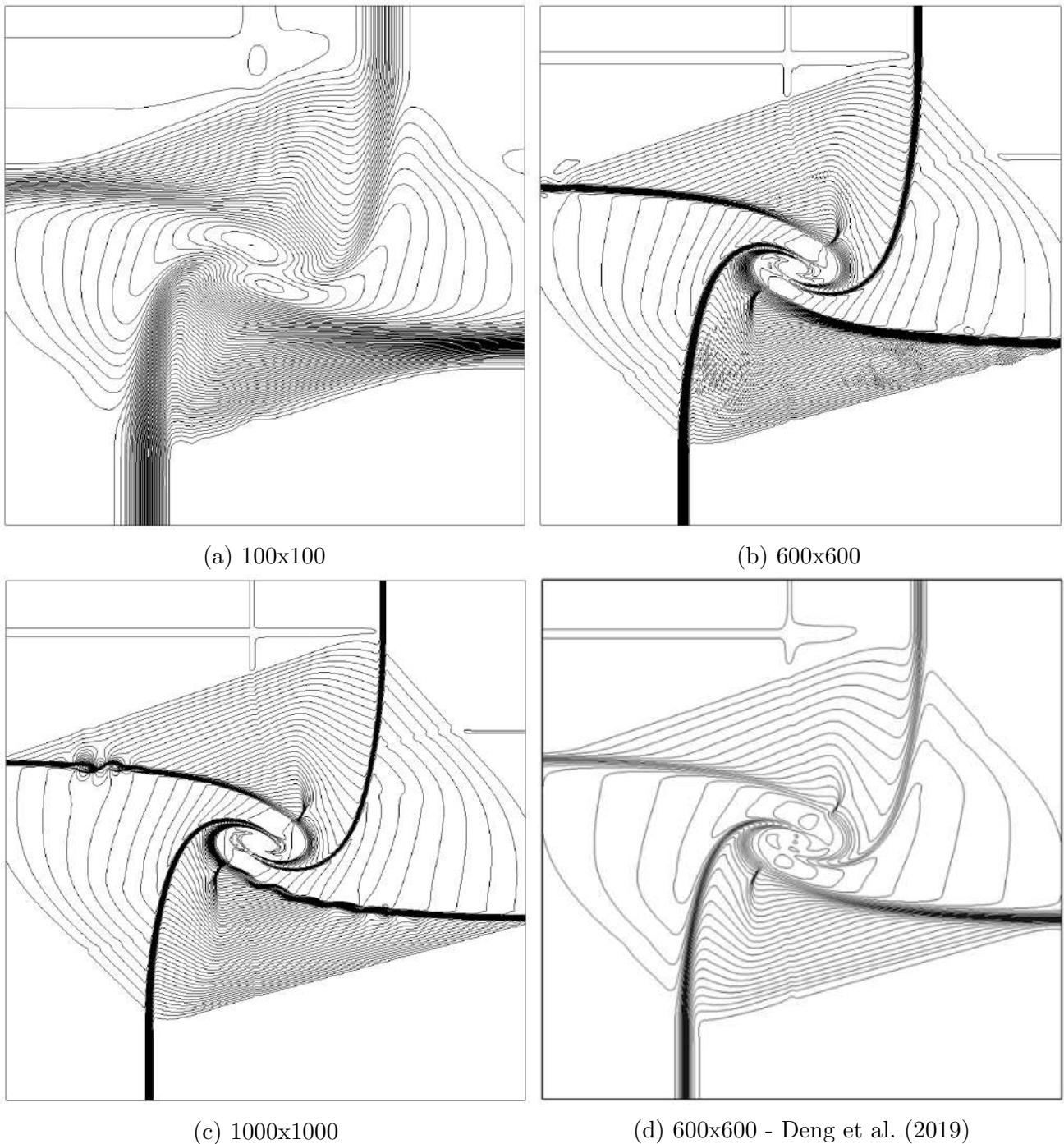


FIGURE 4.30 – Isocontours de masse volumique obtenus après un temps $\tau = 0.3$ lors de la simulation du problème de Riemann. Les Figures 4.30a, 4.30b et 4.30c sont issues de calculs avec le solveur HLLC MUSCL d'AVBP et contiennent 60 lignes d'isocontours tandis que la Figure 4.30d est tirée de Deng et al. (2019).

Convection d'un vortex isentropique

La précision du schéma numérique développé dans AVBP est maintenant vérifiée à l'aide d'un cas de convection d'un tourbillon isentropique, compressible et bidimensionnel par un écoulement à vitesse constante. Comme expliqué par Lamarque (2007), ce cas, également appelé COVO, représente de manière simplifiée la façon dont la résolution des équations d'Euler va modifier une structure turbulente à cause des erreurs de dissipation et de dispersion relatives au schéma numérique. Le cas test est largement inspiré d'une configuration présentée dans la thèse de Vanharen (2017) et a été utilisé pour comparer plusieurs code CFD dans le Workshop on High CFD Methods (Wang et al. 2013). Notons également qu'il a été simulé par Joncquières (2019) pour caractériser les solveurs de Riemann disponibles dans la code AVIP.

Un tourbillon isentropique de rayon $R_c = 5$ mm et d'intensité $\Gamma = 0.2$ m²/s est initialisé dans un écoulement homogène à pression ($P_0 = 1$ bar), température ($T_0 = 300$ K) et vitesse U_0 constantes. La vitesse U_0 est définie pour que le nombre de Mach de l'écoulement soit $M_0 = U_0/\sqrt{\gamma r_{air} T_0} = 0.5$. L'écoulement est uniquement constitué d'air ($\gamma = 1.4$ et $r_{air} = 287.15$ J/kg/K). Afin de pouvoir comparer les résultats obtenus avec le schéma Lax-Wendroff (Lax & Wendroff 1960) d'AVBP (pour lequel la fermeture thermodynamique NASG n'est pas implémentée), la fermeture thermodynamique des gaz parfaits est considérée pour ce calcul. Le tourbillon est placé au centre d'un domaine 2D périodique de 10cm \times 10cm. Le tourbillon est défini par les champs de vitesse et de pression suivants :

$$u = U_0 - \frac{\Gamma}{R_c^2} (y - y_c) \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x - 5.10^{-3})^2 + (y - 5.10^{-3})^2}{R_c^2} \right] \quad (4.118a)$$

$$v = U_0 - \frac{\Gamma}{R_c^2} (x - x_c) \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x - 5.10^{-3})^2 + (y - 5.10^{-3})^2}{R_c^2} \right] \quad (4.118b)$$

$$P = P_0 - \frac{\rho_0 \Gamma^2}{R_c^2} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x - 5.10^{-3})^2 + (y - 5.10^{-3})^2}{R_c^2} \right] \quad (4.118c)$$

$$(4.118d)$$

La Figure 4.31 présente une visualisation des différents champs de la solution initiale sur le maillage le plus fin. Après un temps de calcul t , la solution analytique attendue correspond à une convection du tourbillon sans déformation sur une distance $U_0 \cdot t$. L'erreur numérique occasionnée par le schéma numérique est calculée comme la norme L^2 de l'erreur relative entre la solution théorique S_{theo} et la solution numérique S_{num} .

$$\epsilon^{L^2} = \frac{1}{DOF} \sqrt{\sum_i^{DOF} \frac{(S_{theo}(x_i) - S_{num}(x_i))^2}{S_{theo}(x_i)^2}} \quad (4.119)$$

où DOF est le nombre de degrés de liberté, i.e. le nombre de points, du maillage considéré. Pour cette étude, l'erreur est calculée à partir du champs d'énergie totale. Un schéma numérique est d'ordre n lorsque son taux de convergence de l'erreur entre la solution numérique S_{num} et la solution exacte S_{theo} est proportionnel à h^n , c'est-à-dire,

$$\|S_{theo} - S_{num}\| = O(h^n) \quad (4.120)$$

où h est un paramètre caractérisant l'approximation (ici $h = 1/DOF$) et $\|\cdot\|$ correspond à une norme (ici la norme L^2 relative). L'ordre d'un schéma correspond alors à la pente de la courbe du logarithme de la norme de l'erreur ϵ^{L^2} en fonction du logarithme de h .

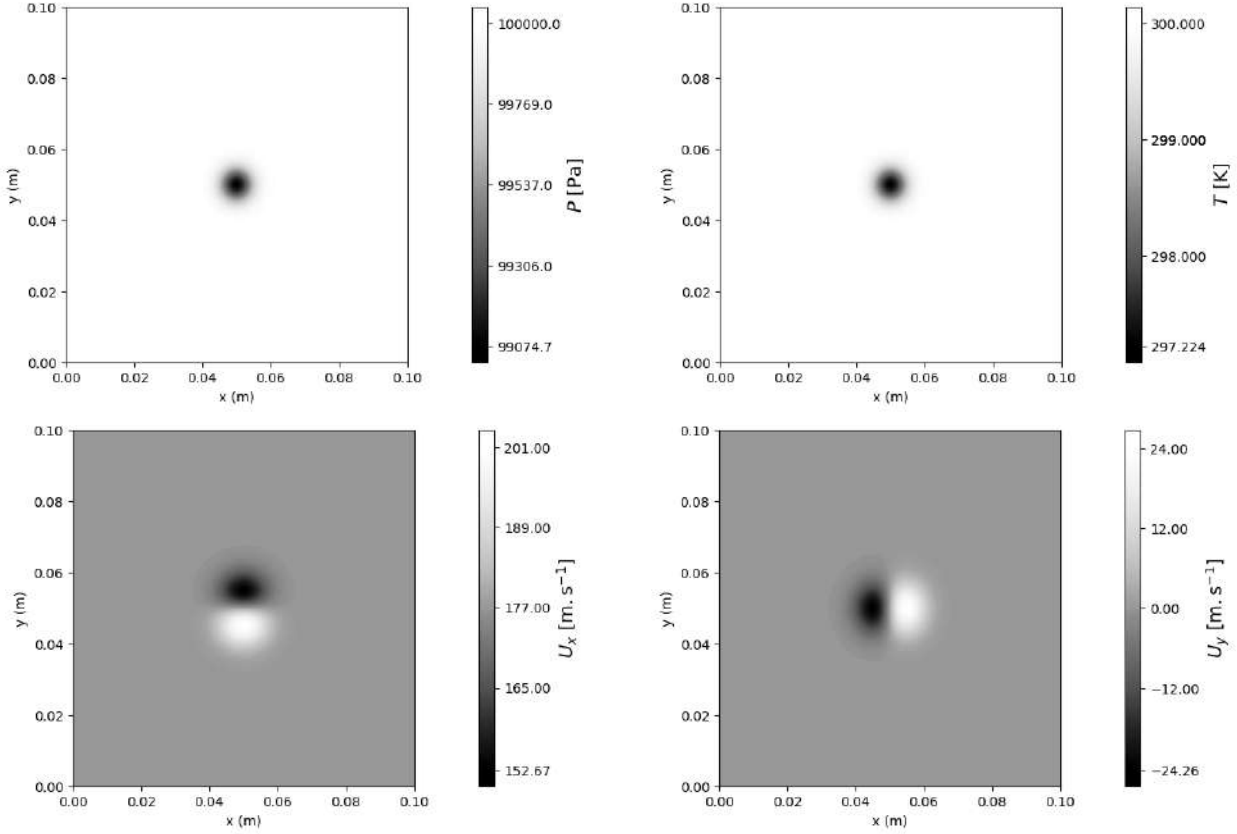


FIGURE 4.31 – Solution initiale du cas test de convection de vortex 2D.

La courbe de la norme de l'erreur ϵ^{L^2} en fonction de h est ici construite en comparant la solution numérique obtenue après la convection du tourbillon sur une distance d avec la solution théorique pour huit maillages différents. Ces maillages sont constitués exclusivement de triangles quasi-équilatéraux. Ils sont construits de façon à avoir un nombre de cellules égal à une puissance de deux dans chaque direction. Le maillage le plus grossier possède 16 cellules dans les directions x et y du domaine (noté 16×16) tandis que le plus fin en contient 2048 (2048×2048). La distance de convection d est choisie suffisamment petite pour que l'ordre effectif du schéma numérique spatial soit retrouvé. En effet, comme le montre Vanharen (2017), l'ordre effectif du schéma dépend directement de la distance de convection. A titre d'exemple, il montre que l'ordre analytique n obtenu pour le transport d'une gaussienne de longueur caractéristique R_c par une équation d'advection 1D résolue avec un schéma du premier ordre est relié à la distance de convection selon l'équation suivante :

$$n = \frac{\eta}{2} \frac{(1 + \eta)^{-3/2} - (1 + 2\eta)^{-3/2}}{(1 + 2\eta)^{-1/2} - 2(1 + \eta)^{-1/2} + 1} \quad (4.121)$$

avec,

$$\eta = d \frac{h}{R_c^2} \quad (4.122)$$

L'ordre 1 est obtenu dans l'équation (4.121) lorsque η est très petit ce qui signifie que plus la distance de convection d est grande plus le maillage doit être fin pour retrouver l'ordre du schéma numérique spatial. La distance de convection est donc fixé à $d = 2 \text{ mm}$ permettant

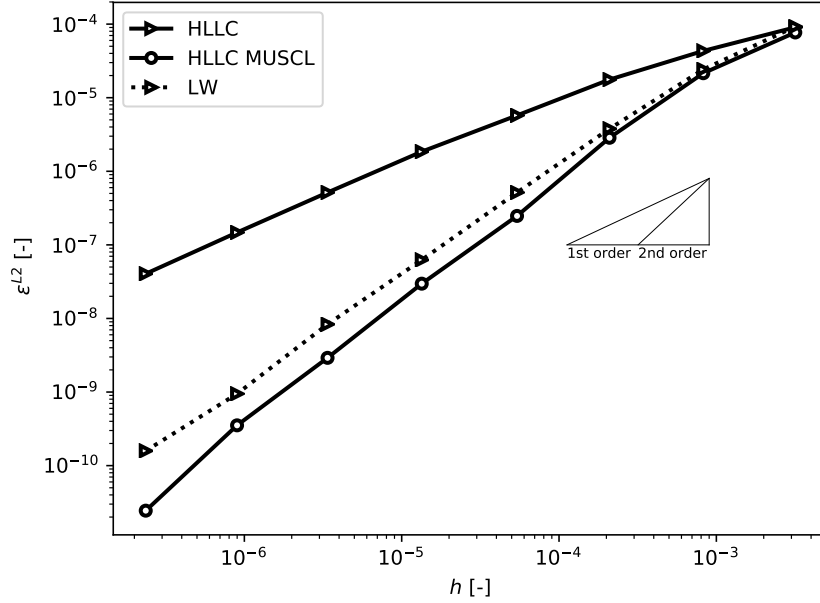


FIGURE 4.32 – Norme relative de l’erreur obtenue à partir du champs d’énergie totale après une convection de 2 cm d’un vortex isentropique 2D pour différents schémas convectifs et pour différentes résolutions de maillage.

de retrouver un ordre théorique très proche de un pour le schéma de premier ordre tout en conservant des niveaux de raffinement de maillage acceptables.

Les calculs sont réalisés avec les schémas numériques Lax-Wendroff (Lax & Wendroff 1960) et le schéma de Godunov (1959) avec (HLLC MUSCL) et sans (HLLC) la reconstruction MUSCL. L’évolution du logarithme de l’erreur ϵ^{L2} en fonction du logarithme de h est présentée en Figure 4.32. L’ordre des schémas est estimé en calculant la pente du segment formé par les trois maillages les plus fins. Conformément aux attentes, le solveur de Riemann HLLC a une ordre de convergence proche de un. L’ajout de la méthodologie MUSCL donne de très bons résultats puisqu’elle permet de gagner un ordre en passant de 0.96 à 1.8. L’intensité de l’erreur est également plus faible ce qui montre que le schéma diffuse moins. Il semble même mieux se comporter sur ce type de maillage que le schéma de Lax-Wendroff qui diffuse légèrement plus et admet un ordre de 1.49 alors que l’ordre 2 est attendu.

	LW	HLLC	HLLC MUSCL
Ordre sur les 3 derniers maillages	1.49	0.96	1.8

FIGURE 4.33 – Ordre de convergence de l’erreur des schémas Lax-Wendroff, HLLC et HLLC MUSCL obtenus sur le cas de convection de vortex isentropique sur un maillage constitué de triangles équilatéraux. L’ordre est déterminé à partir des pentes des courbes en Figure 4.32 avec l’erreur donnée par les trois maillages les plus fins (512×512 , 1024×1024 et 2048×2048).

En plus de pouvoir gérer des discontinuités, ce cas test montre que le solveur de Riemann HLLC couplé à la méthodologie MUSCL permet d’obtenir des résultats au moins aussi précis que le schéma de Lax-Wendroff qui est pour l’heure très utilisé dans AVBP. Dans la partie

suivante, nous allons nous intéresser à la prise en compte des termes diffusifs dans les équations.

4.6 Ajout des termes diffusifs

Comme expliqué précédemment, le modèle à 4 équations suppose l'équilibre mécanique et thermique entre les différents composants. Ceci signifie qu'on considère localement un mélange homogène où tous les constituants partagent les mêmes pression, température et vitesse. L'ajout des termes diffusifs au système d'équations se fait donc directement en considérant un mélange. Ceci s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4.123a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P \bar{\bar{I}}) = \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}}) \quad (4.123b)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \vec{u}) = \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}} \cdot \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q} \quad (4.123c)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k (\vec{u} + \vec{v}_k)) = 0 \quad (4.123d)$$

Où est le tenseur des contraintes visqueuses et s'exprime comme :

$$\bar{\bar{\tau}} = -\frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{u} \bar{\bar{I}} + 2\mu \bar{\bar{S}} \quad (4.124)$$

$\bar{\bar{S}}$ est le tenseur des déformations et s'exprime comme $\bar{\bar{S}} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T)$. Le flux d'énergie \vec{q} est classiquement calculé par la formule suivante :

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k \vec{v}_k \quad (4.125)$$

Dans l'équation (4.125), λ est le coefficient de conduction thermique du mélange tandis que h_k et \vec{v}_k sont respectivement l'enthalpie et la vitesse de diffusion de l'espèce k . Cette dernière est calculée à partir de l'approximation de Hirschfelder et al. (1954) corrigée :

$$\vec{v}_k = -D_k \frac{\nabla X_k}{X_k} + \vec{v}_c \quad (4.126)$$

où X_k fait référence à la fraction molaire de l'espèce k et, \vec{v}_c est une vitesse de correction introduite pour assurer la conservation du bilan de masse $\sum_{k=1}^N Y_k \vec{v}_k = \vec{0}$. Elle s'exprime :

$$\vec{v}_c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \quad (4.127)$$

La viscosité dynamique μ et le coefficient de conduction thermique λ sont calculés à partir de la loi de mélange proposée par Deng & Boivin (2020) qui garantit leur continuité à travers l'interface.

$$\mu = \alpha_l \mu_l + \alpha_g \mu_g \quad (4.128)$$

$$\lambda = \alpha_l \lambda_l + \alpha_g \lambda_g \quad (4.129)$$

où α_l et α_g représentent les fractions volumiques de liquide et de gaz. Dans notre cas, nous considérons toujours une seule liquide en présence d'un mélange de gaz. Les fractions volumiques s'expriment alors $\alpha_l = \alpha_1$ et $\alpha_g = \sum_{k=2}^N \alpha_k$. Notons ici que la fraction volumique d'une espèce α_k est directement calculée à partir de la masse volumique du mélange ρ , de la masse volumique ρ_k de l'espèce ainsi que de la fraction massique locale Y_k .

$$\alpha_k = \frac{\rho Y_k}{\rho_k} \quad (4.130)$$

Dans les équations (4.128) et (4.129), μ_l et λ_l représentent la viscosité dynamique et le coefficient de conduction thermique de la phase liquide tandis que μ_g et λ_g font références à la phase gazeuse. Ces paramètres sont considérés constants et indépendants de la température dans la phase liquide.

La viscosité dynamique de la phase gazeuse μ_g varie en fonction de la température mais est supposée être indépendante de la composition du mélange. Son comportement est donc modélisé par une simple loi d'évolution en fonction de la température comme une loi de Sutherland (4.131) ou une "power-law" (4.132).

$$\mu_g = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S} \quad (4.131)$$

$$\mu_g = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^\beta \quad (4.132)$$

où μ_0 est la viscosité dynamique de référence du mélange prise à la température T_0 (typiquement $T_0 = 300$ K). S et β sont des paramètres choisis pour représenter au mieux la courbe analytique d'évolution.

Le coefficient de conduction thermique de la phase gazeuse λ_g est calculé à partir du nombre de Prandtl Pr , de la viscosité dynamique μ_g et de la capacité calorifique moyenne $\overline{C_{p,g}}$ dans la phase gazeuse.

$$\lambda_g = \frac{\mu_g \overline{C_{p,g}}}{Pr} \quad (4.133)$$

avec,

$$\overline{C_{p,g}} = \frac{\sum_{k=2}^N Y_k C_{p,k}}{\sum_{k=2}^N Y_k} \quad (4.134)$$

Le coefficient de diffusion D_k , présent dans les équations (4.126) et (4.127), est déterminé pour l'espèce k appartenant à la phase gazeuse ($k \geq 2$) à partir de son nombre de Schmidt Sc_k par l'approximation suivante (Poinsot & Veynante 2005) :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (4.135)$$

Afin de ne pas diffuser la phase liquide dans le gaz, nous faisons l'hypothèse que l'unique espèce $k = 1$ dont elle est constituée ne se diffuse pas. Cette considération initialement proposée par Deng & Boivin (2020) conduit à un coefficient de diffusion D_1 nul. Bien que critiquable en présence d'une phase liquide multi-espèce, cette hypothèse constitue une bonne approximation dans le cas d'un liquide mono-espèce. Plus généralement, il convient de noter que la diffusion des

espèces dans le contexte du modèle aux interfaces diffuses à 4 équations pose un certain nombre de problèmes. En effet, l'hypothèse d'équilibre mécanique et thermique amène à considérer un mélange homogène diphasique en tout point du domaine. Cette hypothèse est parfaitement valide lorsque le mélange est en phase pure mais pose problème dans l'interface où la diffusion des espèces gazeuses engendre inévitablement la diffusion de l'interface elle-même. Ce phénomène est particulièrement visible pour les écoulements à faible vitesse convective pour lesquels les nombres de Péclet massiques des espèces gazeuses sont faible $Pe_{m,k} = \frac{uL_c}{D_k}$ (L_c est une longueur caractéristique de l'écoulement). Ce type d'écoulement est rencontré dans la thèse par exemple pour les tests de loi de Laplace, d'oscillation ou l'impact de goutte ou encore pour le cas de film liquide cisailé. Afin d'éviter ce phénomène non-physique, les termes liés à la diffusion des espèces sont négligés dans ces cas. Des travaux devront cependant être menés dans l'avenir pour permettre la prise en compte de ces termes dans tous les types d'écoulements.

La prise en compte de la force de tension de surface ainsi que la validation de son implémentation sont présentées dans la partie suivante.

4.7 Prise en compte de la force de tension de surface

4.7.1 Généralités sur la force de tension de surface

Les effets capillaires sont des phénomènes de première importance dans la simulation des écoulements diphasiques. Ils assurent la cohésion de la phase liquide et sont responsables de la formation des gouttes. Ils sont caractérisés par une force d'interface appelée tension superficielle. Cette force trouve son origine dans le déséquilibre d'attraction moléculaire qui existe à l'interface entre la phase condensée et le gaz. Lorsqu'une particule fluide appartenant au liquide est située sur une interface liquide/gaz, elle subit une interaction plus forte de la part de ses voisines situées dans la phase liquide que dans la phase gazeuse. Le déséquilibre tend alors à faire "plonger" cette particule fluide vers le reste de la phase liquide réduisant ainsi la surface de l'interface jusqu'à une situation d'équilibre. L'énergie E_s nécessaire à la formation de l'interface de surface S , c'est-à-dire l'énergie nécessaire pour briser les liaisons qui existent avec les molécules situées d'un côté de cette interface, s'exprime alors de la façon suivante :

$$E_S = \sigma S \quad (4.136)$$

où σ est une constante dépendante du fluide appelée coefficient de tension de surface. Elle est homogène à une énergie par unité de surface [N.m^{-1}]. Un bilan des contraintes qui s'exercent à travers une interface liquide/gaz permet de mettre en évidence l'action de cette force (voir par exemple Craster & Matar (2009)) :

$$j_e[\vec{u}_e] + ([P]\vec{I} - [\tau])\vec{n} = \kappa \sigma \vec{n} - \nabla_s \sigma \quad (4.137)$$

Pour une grandeur arbitraire X , la notation $[X]$ représente la différence entre la grandeur dans le gaz et celle dans le liquide (i.e. $[X] = X_{\text{gaz}} - X_{\text{liq}}$). \vec{I} , \vec{n} et P sont respectivement le vecteur identité, le vecteur normal à l'interface et la pression. j_e est le débit massique normal à l'interface. Il est présent en cas d'échange de masse entre les deux phases dans les cas d'évaporation ou de condensation. Le terme $[\vec{u}_e]$ représente la différence de vitesse relative à l'interface. De même que pour les échanges de masse, la vitesse n'est pas constante à travers l'interface en

présence d'évaporation ou de condensation. Le membre de droite de l'équation (4.137) représente les effets de tension de surface. Tout d'abord, le terme $\kappa \sigma \vec{n}$ est la force de tension de surface engendrée par la courbure locale κ de l'interface. Elle agit dans la direction normale à l'interface et est maximale lorsque celle-ci est localement courbée. Ce terme à lui seul tend à minimiser l'énergie d'interface E_s en poussant, via sa courbure, vers une minimisation de sa surface. Ensuite, la valeur de la tension de surface σ peut varier le long de l'interface sous l'effet d'un changement de température ou de composition de la phase liquide. Les contraintes surfaciques générées par cette variation sont décrites par le terme $\nabla_s \sigma$, où ∇_s représente l'opérateur de gradient surfacique défini comme suit :

$$\nabla_s = (\vec{I} - \vec{n}\vec{n}) \cdot \nabla \quad (4.138)$$

où \vec{I} est le vecteur identité. Bien que le terme $\nabla_s \sigma$ soit négligeable dans le cas d'une phase liquide pure soumise à de faibles variations de température, il peut engendrer dans certains cas des phénomènes de transport de matière le long de l'interface connus sous le nom d'effet Marangoni. Les "larmes de vin" en sont une bonne illustration.

4.7.2 Modélisation de la force de tension de surface : l'approche de Brackbill

La nature surfacique de la force de tension de surface rend sa modélisation dans les équations complexes. De plus, dans l'approche aux interfaces diffuses, l'interface est représentée par une zone de fort gradient de masse volumique d'épaisseur δ_s non-nulle. Dans ces conditions, il est intéressant d'interpréter la force de tension de surface comme une force volumique $\vec{F}_{\sigma,V}$ telle que son intégrale sur le volume de la zone d'interface V_i soit égale à la force de tension surfacique $\vec{F}_{\sigma,S}$ lorsque l'épaisseur de l'interface δ_s tend vers zero.

$$\lim_{\delta_s \rightarrow 0} \int_{V_i} \vec{F}_{\sigma,V} dV = \int_{S_i} \vec{F}_{\sigma,S} dS \quad (4.139)$$

Où S_i est la surface de l'interface. Cette formulation est appelée Continuum Surface Force (CSF) et a été proposée par Brackbill et al. (1992). En supposant que la tension de surface σ est constante le long de l'interface (pas d'effet Marangoni), Brackbill et al. (1992) ont montré que la force volumique $\vec{F}_{\sigma,V}$ s'exprime de la manière suivante :

$$\vec{F}_{\sigma,V} = \sigma \kappa \nabla C \quad (4.140)$$

C est une fonction couleur continue et dérivable dont le but est de localiser l'interface entre les deux phases. Cette fonction est également utilisée pour calculer la courbure locale κ de l'interface.

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla C}{|\nabla C|} \right) \quad (4.141)$$

Notons que le terme dans l'opérateur divergence représente le vecteur normal à l'interface.

La fonction couleur C permet de déterminer la zone d'application et l'intensité de la force de tension de surface. Son choix est donc critique car elle doit représenter au mieux l'interface si l'on souhaite obtenir le bon comportement physique. Comme rappelé par Perigaud & Saurel (2005), elle doit remplir trois conditions :

1. C doit avoir une valeur constante dans chaque phase excepté dans la région proche de l'interface.
2. \vec{C} doit être orienté vers la phase de plus forte densité.
3. C doit être différentiable partout dans le domaine.

Plusieurs variables de l'écoulement répondent à ces trois critères. Dans ses travaux sur la simulation de phénomènes d'ébullition nucléée, Le Martelot et al. (2014) proposent d'utiliser la fraction de masse de la phase liquide Y_1 . Cette expression, reprise dans le papier de revue de Saurel & Pantano (2018), leur permet de retrouver la formation des bulles de vapeur. Cependant, bien qu'elle ait été validée au cours de la thèse de Le Martelot (2013) sur un cas statique de pression de Laplace, aucune validation avec une interface dynamique n'a été réalisée. Or, il nous a été impossible de retrouver la bonne dynamique de l'interface avec cette méthode sur des cas tels que l'oscillation d'une goutte ou l'impact de deux gouttes étudiés dans la suite. Ceci s'explique par l'incohérence spatiale entre le profil de fraction massique de liquide et le profil de masse volumique à travers l'interface. En effet, ce dernier est beaucoup plus raide que le profil de fraction de masse. La Figure 4.34 (gauche) permet de comparer l'évolution de la masse volumique ρ en fonction de la fraction de masse de liquide Y_1 dans le cas d'une interface eau/air. On peut constater que la masse volumique évolue très lentement jusqu'à $Y_1 \approx 0.99$ puis augmente de façon brutale lorsque le liquide est presque pur. Supposons maintenant que le profil de fraction de masse à travers l'interface ait une forme de tangente hyperbolique (i.e. un créneau diffusé). Dans ce cas, la zone où la force est la plus forte sera obtenue pour $Y_1 = 0.5$ où $\rho = 2.2 \text{ kg/m}^3$ et non dans la zone de fort gradient de masse volumique. Comme le montre la Figure 4.34 (droite), la masse volumique évolue linéairement en fonction de la fraction volumique de liquide. Ceci signifie que les profils de fraction volumique de liquide et de masse volumique évoluent de la même façon à travers une interface. Le choix de la fraction volumique de liquide comme fonction couleur, également réalisé dans Perigaud & Saurel (2005), permet donc d'obtenir un meilleur accord entre le gradient de masse volumique et l'application de la force de tension de surface. Il est montré dans la suite que cette formulation permet de prédire correctement la dynamique de l'interface.

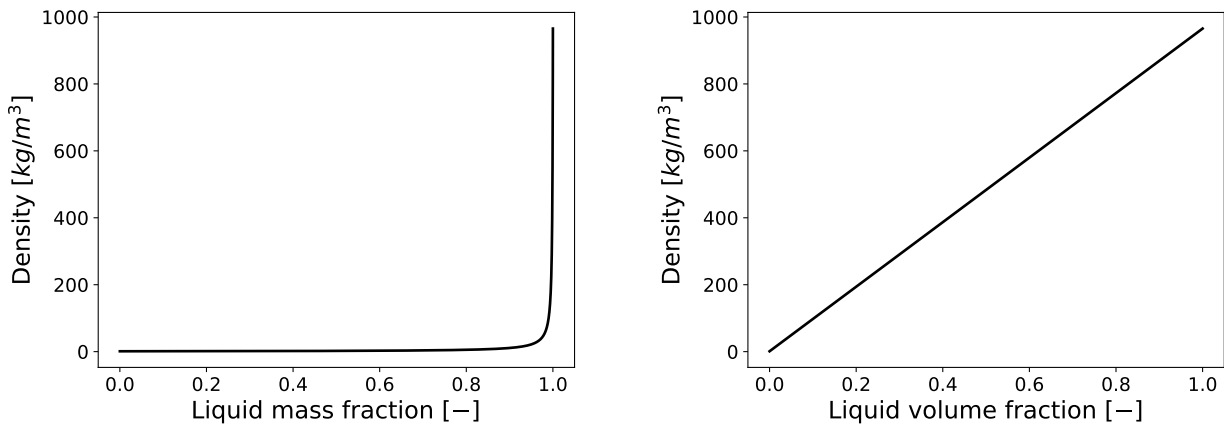


FIGURE 4.34 – Evolution de la masse volumique d'un mélange diphasique eau/air à pression 1 bar et température 293 K en fonction de la fraction massique de liquide (gauche) et fraction volumique de liquide (droite).

La force volumique $\vec{F}_{\sigma,V}$ est ensuite prise en compte dans le système d'équations (4.123)

en ajoutant sa contribution dans les équations de conservation de la quantité de mouvement (4.123b) et de l'énergie (4.123c).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4.142a)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P \bar{I}) = \nabla \cdot (\mu \bar{\tau}) + \vec{F}_{\sigma, V} \quad (4.142b)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \vec{u}) = \nabla \cdot (\mu \bar{\tau} \cdot \vec{u}) - \nabla \vec{q} + \vec{u} \cdot \vec{F}_{\sigma, V} \quad (4.142c)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k (\vec{u} + \vec{v}_k)) = 0 \quad (4.142d)$$

Dans le système d'équations (4.142), la force de tension de surface $\vec{F}_{\sigma, V}$ est écrite dans une formulation non-conservative. Il est possible d'améliorer le modèle, et en particulier la prédiction du saut de pression à l'interface, en intégrant le terme de tension de surface de manière conservative (i.e. directement dans les flux). Pour ce faire, Gueyffier et al. (1999) proposent d'exprimer le tenseur des contraintes \bar{T}_σ issues de la force de tension de surface $\vec{F}_{\sigma, V}$, tel que $\vec{F}_{\sigma, V} = \nabla \cdot \bar{T}_\sigma$, par la formule suivante :

$$\bar{T}_\sigma = \sigma \left(|\nabla C| \bar{I} - \frac{\nabla C \otimes \nabla C}{|\nabla C|} \right) \quad (4.143)$$

L'équation (4.142b) devient alors :

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P \bar{I} - \sigma \left(|\nabla C| \bar{I} - \frac{\nabla C \otimes \nabla C}{|\nabla C|} \right) \right) = \nabla \cdot (\mu \bar{\tau}) \quad (4.144)$$

La forme conservative de l'équation d'énergie (eq. (4.142c)) a été obtenue par Perigaud & Saurel (2005) en exprimant le travail de la force de tension de surface $\vec{u} \cdot \vec{F}_{\sigma, V}$ sous la forme d'une divergence. L'équation (4.142c) devient alors :

$$\frac{\partial \rho E + \sigma |\nabla C|}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + \sigma |\nabla C| + P) \vec{u} - \sigma \bar{T}_\sigma \cdot \vec{u}) = \nabla \cdot (\mu \bar{\tau} \cdot \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q} \quad (4.145)$$

Notons ici que le terme $\sigma |\nabla C|$ dans l'équation (4.145) est assimilable à une énergie potentielle ϵ_σ résultante des effets de tension de surface :

$$\epsilon_\sigma = \frac{\sigma}{\rho} |\nabla C| \quad (4.146)$$

Implémentation de la force de tension de surface dans AVBP

Bien que la formulation conservative permette une meilleure prise en compte des effets de tension de surface, elle présente des inconvénients d'implémentation majeurs. Tout d'abord, elle modifie la formulation de l'énergie totale en y ajoutant l'énergie potentielle d'interface ϵ_σ . Ceci a pour conséquence de nécessiter des changements dans un grand nombre de parties du code. Ensuite, elle demande de modifier le solveur numérique de Riemann afin de prendre en compte la force de tension de surface. AVBP étant un code multiphysique avec notamment des

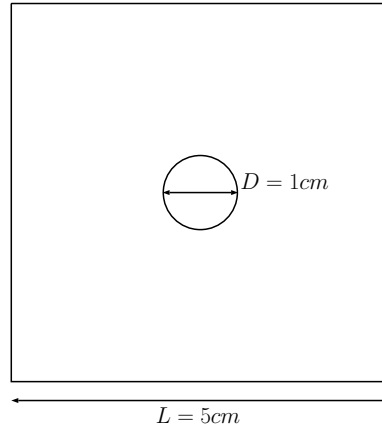


FIGURE 4.35 – Schéma du cas test de loi de Laplace

applications purement monophasiques, la formulation non-conservative, où la force de tension de surface est prise en compte sous la forme d'un terme source, est préférée pour ce travail en raison de sa flexibilité d'implémentation. De ce fait, pour chaque pas de temps, le terme de tension de surface est calculé indépendamment de la partie hyperbolique des équations. La fraction de volume de l'espèce liquide est reconstruite à partir de l'équation (4.130) puis, est utilisée comme fonction couleur. Le gradient ainsi que la divergence sont calculés à l'aide de la méthodologie 4Δ présentée dans Lamarque (2007). Basée sur un stencil de $4\Delta x$, où Δx est la taille caractéristique d'une cellule, cette méthode permet de limiter les oscillations point à point (et donc l'apparition de courants parasites au niveau de l'interface) en filtrant par construction les instabilités numériques d'une longueur d'onde inférieures à la taille du stencil.

4.7.3 Validation de l'implémentation de la force de tension de surface

L'implémentation de la force de tension de surface et la capacité du code à prédire correctement les effets capillaires sont testées dans cette partie à travers trois cas tests 2D. Le premier cas test est un cas statique et consiste à vérifier que le code est bien en mesure de prédire la surpression engendrée par la force de tension de surface dans une goutte statique au repos. Les deux cas suivants sont des cas dynamiques. Le premier permet de vérifier que le code reproduit bien la fréquence d'oscillation d'une goutte initialement de forme elliptique lâchée dans un écoulement au repos. Le deuxième permet de regarder, à travers la collision de deux gouttes 2D, la capacité du code à simuler les phénomènes de coalescence et la séparation d'interfaces.

Loi de Laplace

La capacité du solveur à retrouver la loi de Laplace est vérifiée dans cette partie. Dans ce test, une goutte de liquide pur de diamètre $D = 1\text{ cm}$ est initialisée au centre d'un domaine carré de $L = 5\text{ cm}$ de côté (Figure 4.35). L'écoulement est initialement au repos avec une pression de 1 bar et une température de 293 K uniformes dans le domaine. La goutte est formée d'eau liquide H_2O tandis que l'ambient est constitué d'oxygène et d'azote à l'état gazeux dans des proportions massiques respectives de 22% et 78%. Afin d'assurer une parfaite stabilité du calcul,

une fraction massique de 10^{-8} de chaque espèce est conservée en tout point du domaine. Les coefficients thermodynamiques des espèces sont dérivés selon la méthode de Boivin et al. (2019) présentée dans la partie 4.3.5 et sont donnés dans le tableau 4.36. Le coefficient de tension de surface vaut $\sigma = 73.10^{-3} \text{ N.m}^{-1}$. Le cas test est réalisé sur un maillage cartésien de 500×500 cellules. L'interface entre le liquide et le gaz est initialisée avec une épaisseur d'environ 0.4 mm, soit 4 cellules. Les termes visqueux et de diffusion sont négligés dans le système d'équations (4.123).

Coefficients	$H_2O(l)$	$O_2(g)$	$N_2(g)$
$C_p \text{ (J/kg/K)}$	4185	919	1045
$C_v \text{ (J/kg/K)}$	4114	650	743
$P_\infty \text{ (Pa)}$	$1.838.10^8$	0	0
$q \text{ (J/kg)}$	$-7.8998.10^5$	$-2.104.10^3$	$-2.355.10^3$
$b \text{ (m}^3/\text{kg)}$	$9.2.10^{-4}$	0	0

FIGURE 4.36 – Coefficients thermodynamics NASG pour les espèces $H_2O(l)$, $O_2(g)$ et $N_2(g)$ déterminés à partir d'une référence NIST (<https://www.nist.gov>) dans la gamme de température [275-475 K] et pour une pression 1bar.

La Figure 4.37 présente le champs de pression à l'équilibre permettant d'observer l'apparition d'une surpression à l'intérieur de la goutte. L'évolution de la différence de pression ΔP par rapport à la valeur initiale de 1 bar est tracée à travers la goutte le long de la ligne en pointillés sur la Figure 4.38. De légères oscillations numériques de la pression sont à noter dans la goutte. Cependant, leurs amplitudes sont très faibles (d'environ 1 Pa au maximum). La valeur de ΔP moyen dans la goutte est choisie comme valeur de référence pour la surpression dans la goutte, soit $\Delta P = 14.43 \text{ Pa}$. La surpression théorique est donnée par la loi de Laplace (équation (4.147)) :

$$\Delta P_{theo} = \frac{\sigma}{0.5D} = 14.6 \text{ Pa} \quad (4.147)$$

L'erreur relative est alors d'environ 1.16% ce qui représente un très bon accord entre la simulation et la théorie.

Goutte oscillante

Le solveur est maintenant utilisé pour simuler un cas test de goutte oscillante. Une goutte de forme elliptique de rayons $a = 1 \text{ mm}$ et $b = 1.66 \text{ mm}$ est alors initialisée au centre d'un domaine carré de $L = 5 \text{ mm}$ de côté (Figure 4.39). Comme dans le cas précédent, la goutte est formée d'eau liquide $H_2O(l)$ tandis que l'ambient est constitué de 22% de masse d'oxygène $O_2(g)$ pour 78% d'azote $N_2(g)$. Les coefficients thermodynamiques des espèces sont dérivés selon la méthode de Boivin et al. (2019) et sont donnés dans le Tableau 4.36. Une fraction massique minimum d'espèce de 10^{-8} est également conservée en tous points du domaine. Le cas est initialisé à une pression de 1 bar et une température de 293 K. Les coefficients thermodynamiques des espèces sont les mêmes que dans le cas précédent et sont donnés dans le Tableau 4.36. Le domaine est discrétisé par un maillage cartésien de 500×500 cellules. L'interface entre le liquide et le gaz est initialisée avec une épaisseur d'environ 0.04 mm, soit 4 cellules. D'après la formule théorique proposée par Fyfe et al. (1988) (eq. (4.148) et (4.149)), la période d'oscillation T_{theo} ne dépend

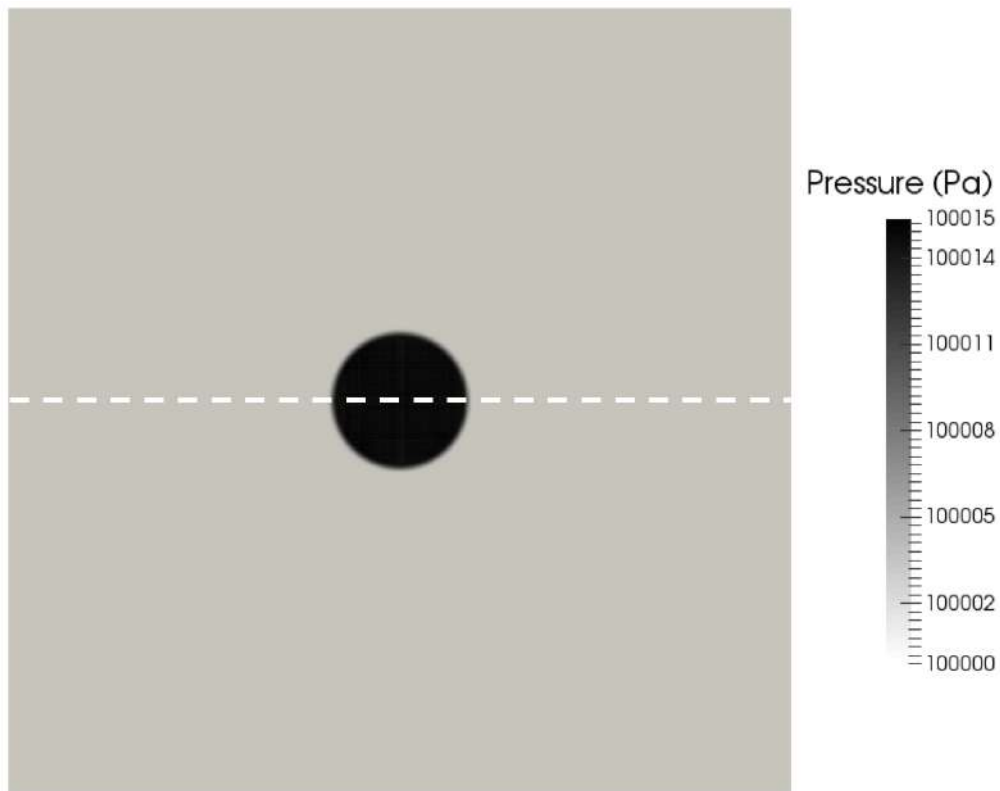


FIGURE 4.37 – Champs de pression à l'équilibre.

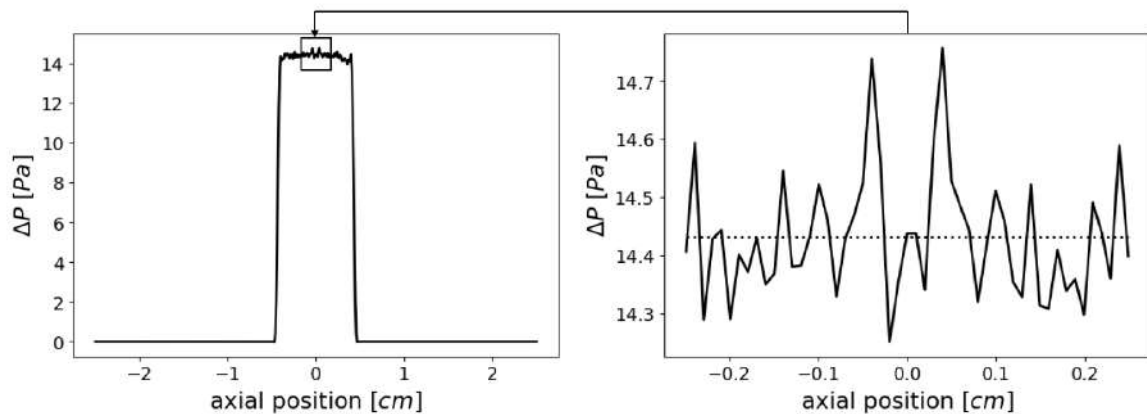


FIGURE 4.38 – Profil de la différence de pression à l'équilibre le long de l'axe en pointillé dans la Figure 4.37. A gauche, le profil complet. A droite, le profil agrandi dans la zone centrale de la goutte.

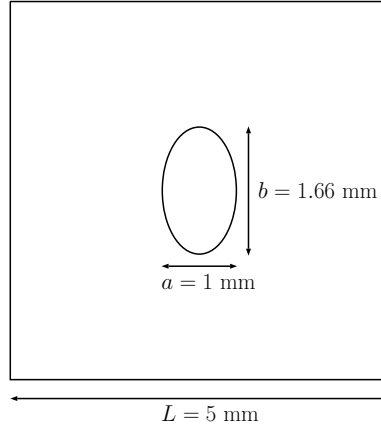


FIGURE 4.39 – Schéma du cas test de goutte oscillante

que des masses volumiques du liquide ρ_l et du mélange gazeux ρ_g , du coefficient de tension de surface σ et du rayon de la goutte à l'équilibre R_{eq} .

$$\omega^2 = (o^3 - o) \frac{\sigma}{(\rho_l + \rho_g) R_{eq}^3} \quad (4.148)$$

où o est le mode d'oscillation et ω la pulsation. Comme dans Perigaud & Saurel (2005), seul le mode de plus large amplitude $o = 2$ est caractérisé dans cette étude. La période T_{theo} est calculée par la relation suivante :

$$T_{theo} = \frac{2\pi}{\omega} \quad (4.149)$$

Il est donc possible de diminuer la période d'oscillation en augmentant la valeur du coefficient de tension de surface. Ce paramètre est alors multiplié par un facteur 100 permettant de simuler un nombre raisonnable d'oscillations tout en conservant un temps de calcul acceptable. Il est donc fixé à $\sigma = 73.10^{-1} \text{ N.m}^{-1}$ dans le calcul.

10 ms de temps physique ont été simulées sur un maillage cartésien de 500×500 cellules avec le solveur de Riemann d'ordre 2 (coefficient du limiteur fixé à $\beta = 1$). La diffusion des espèces dans le système d'équations (4.123) est négligée. En effet, ce terme ne joue pas de rôle dans la dynamique de ce cas quasi-statique mais est en revanche la cause d'une diffusion excessive de l'interface. La Figure 4.40 présente des visualisations de la goutte pendant une période d'oscillation. Sous l'effet de la tension de surface, la goutte elliptique initialement au repos en position verticale à $t = 0.47$ ms se déforme pour atteindre une forme d'équilibre circulaire. Cependant, lorsque celle-ci est obtenue, vers $t = 0.57$ ms, l'énergie cinétique contenue dans la goutte est maximale ce qui empêche la goutte de s'établir et engendre une déformation de la goutte. A $t = 0.7$ ms, la goutte a retrouvé une forme elliptique en position horizontale. L'énergie cinétique est alors ponctuellement proche de zéro puis augmente de nouveau sous l'effet de la tension de surface. Elle se déforme de nouveau pour atteindre un état circulaire vers $t = 0.81$ ms avant de retrouver sa forme elliptique initiale en position verticale vers $t = 0.92$ ms. Ce schéma d'oscillation se répète tout au long du calcul.

L'évolution du diamètre a de la goutte est tracée sur la Figure 4.41. Notons, ici que, du fait de la dissipation de l'énergie cinétique par la viscosité, l'amplitude des oscillations diminue au cours du temps jusqu'à converger au bout d'un temps très long vers le diamètre d'équilibre. La période d'oscillation de la goutte est déterminée en appliquant une transformée de Fourier au

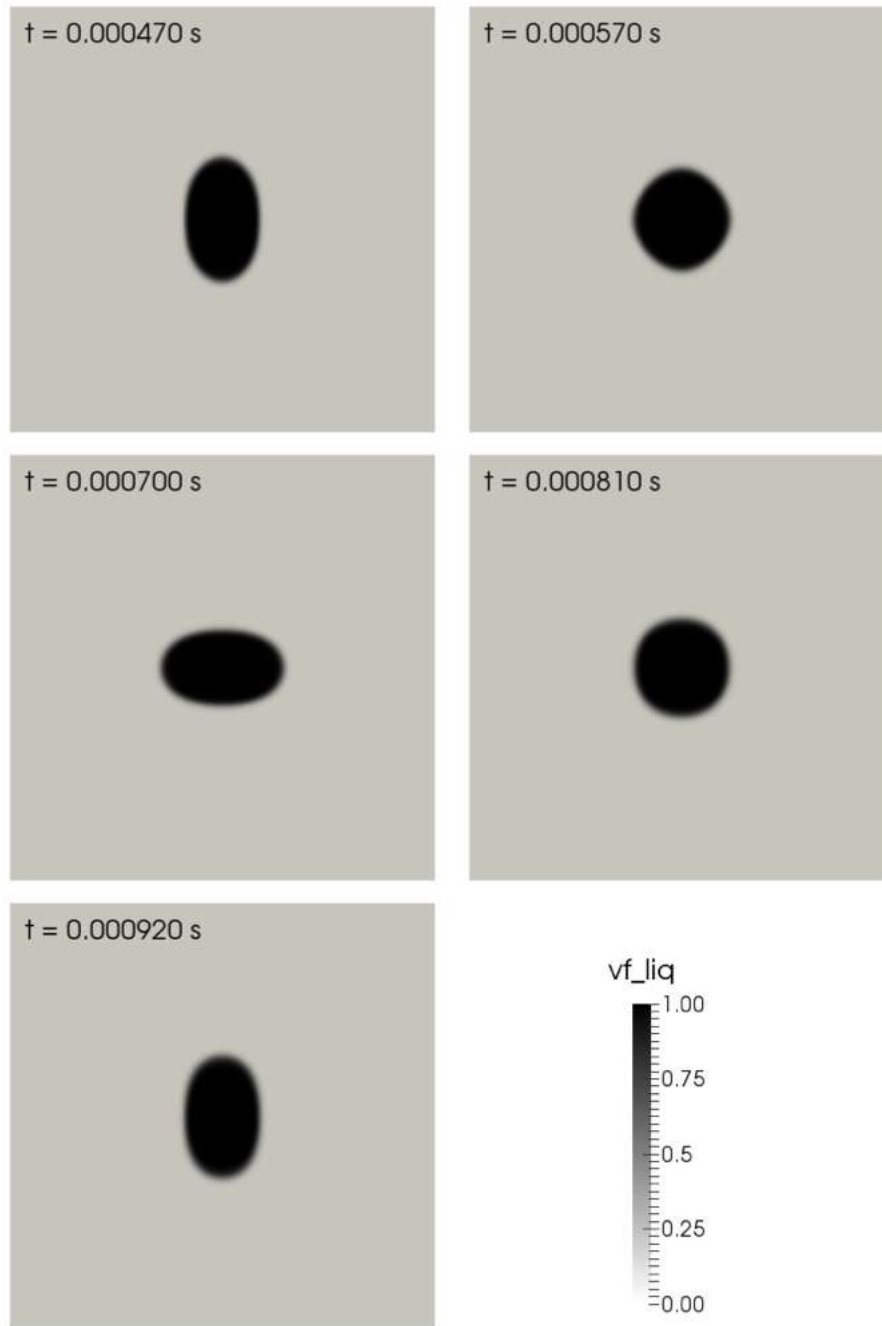


FIGURE 4.40 – Snapshots présentant l'évolution de la forme de la goutte pendant une période d'oscillation coloré par le fraction volumique de liquide vf_liq .

signal précédent et vaut $T_{num} = 0.4390$ ms. La formule théorique (eq. 4.148 et 4.149) donne $T_{theo} = 0.4067$ ms. L'erreur numérique est alors d'environ 7.95% par rapport à la théorie. Cette erreur est acceptable et permet de valider la capacité de notre solveur à simuler ce type de phénomène. Notons cependant que certains auteurs, comme Perigaud & Saurel (2005), obtiennent des erreurs plus faibles (de l'ordre de 2%) en intégrant, comme présenté dans la partie 4.7.2, la force de tension de surface sous une forme conservative dans les équations de quantité de mouvement et d'énergie du système (4.123). Ceci pourra être envisagé à terme pour

améliorer la prédiction du solveur.

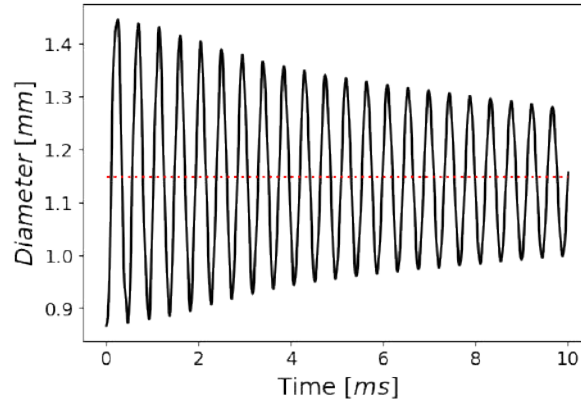


FIGURE 4.41 – Oscillation au cours du temps du diamètre a de la goutte (ligne noire) autour du diamètre d'équilibre de la goutte (ligne rouge pointillée).

Collision de deux gouttes 2D

Un cas de collision de goutte 2D est à présent réalisé afin d'observer la capacité du code à gérer la coalescence et la séparation d'interfaces. Ces deux phénomènes sont en effet d'une importance primordiale pour la création d'un spray où ils sont non-seulement présents lors de l'atomisation primaire avec la désintégration des ligaments en grosses gouttes mais aussi, lors de l'atomisation secondaire où les grosses gouttes se scindent en plus petites à cause du cisaillement créé par leur différence de vitesse avec l'ambiant ou des collisions entre elles. De nombreuses études expérimentales, comme par exemple Adam et al. (1968), Ashgriz & Poo (1990), Jiang et al. (1992), Estrade et al. (1999), ont permis de caractériser les différents régimes de collision entre deux gouttes. Ces études ont montré que le résultat de la collision entre deux gouttes dépend du rapport, caractérisé par un nombre de Weber We , entre l'énergie cinétique d'impact (i.e. la vitesse des gouttes) et la tension de surface, d'un paramètre d'impact X lié au décalage entre les deux gouttes ainsi que, de leur différence de tailles. Pour une différence de tailles de gouttes fixée, les régimes de collision sont alors classiquement décrits dans un diagramme (We, X) . En considérant deux gouttes d'eau avec un rapport de taille unitaire, Ashgriz & Poo (1990) proposent, par exemple, la carte de régimes présentée en Figure 4.42. Le nombre de Weber y est défini par la formule suivante :

$$We = \frac{\rho_l D (2U)^2}{\sigma} \quad (4.150)$$

où ρ_l et σ sont la masse volumique et le coefficient de tension de surface du liquide constituant les gouttes. D est le diamètre des gouttes et U correspond à leur vitesse. Le paramètre d'impact X est défini par le rapport entre le décalage horizontal l entre les deux gouttes et leur diamètre D :

$$X = \frac{l}{D} \quad (4.151)$$

Il convient de noter que le cas où les gouttes sont initialement parfaitement alignées est donné par $X = 0$. Ashgriz & Poo (1990) observent trois régimes de collision possibles :

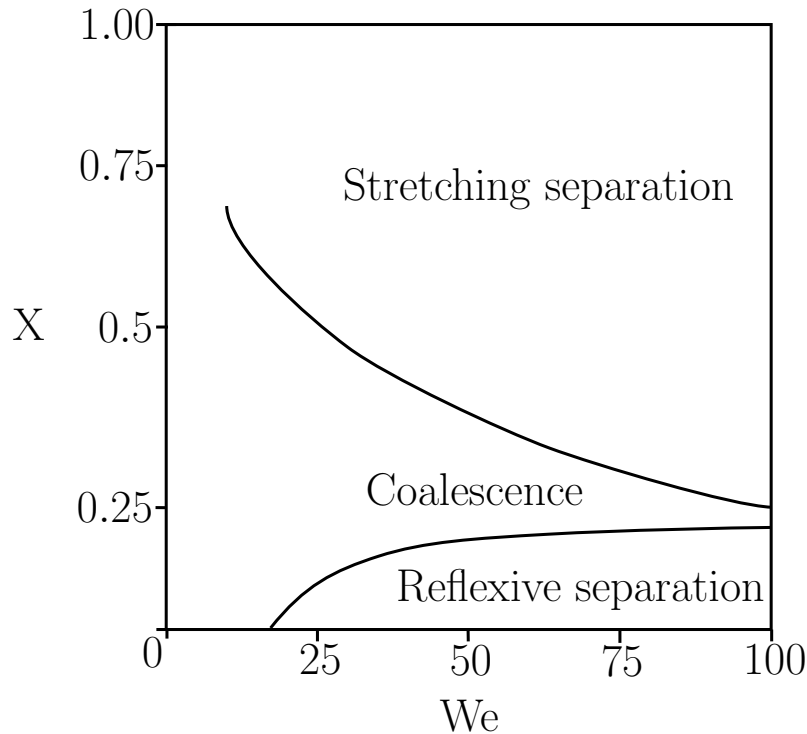


FIGURE 4.42 – Exemple de carte des régimes de collision obtenue par Ashgriz & Poo (1990) à partir de gouttes d'eau de même diamètre.

- Le régime "Coalescence" (Figure 4.43a) : Les deux gouttes s'impactent puis fusionnent pour ne former qu'une seule goutte.
- Le régime "Reflexive separation" (Figure 4.43b) : Les deux gouttes fusionnent puis forment un cylindre qui s'allonge et fini par se séparer en plusieurs gouttes sous l'effet des forces de tension de surface.
- Le régime "Stretching separation" (Figure 4.43c) : Ce régime apparaît lorsque les deux gouttes s'impactent avec un décalage suffisamment important. Lors de l'impact, seule une partie des gouttes sont en contact l'une de l'autre ce qui engendre la formation d'un ligament reliant les deux gouttes qui s'étire jusqu'à se rompre en formant des gouttes.

Pour des raisons de coût de calcul lié au manque d'optimisation du solveur, la configuration simulée a due être réduite à un cas 2D. Deux gouttes 2D de diamètre $D = 0.5$ mm sont initialisées au centre d'un domaine carré de $L = 7.5$ mm de côté avec un espacement de deux diamètres (Figure 4.44). Les gouttes sont formées d'eau liquide $H_2O(l)$ et l'ambient est constitué d'un mélange d'oxygène et d'azote dans des proportions de masse respectives de 22% et 78%. Les coefficients thermodynamiques des différentes espèces sont donnés dans le Tableau 4.36 et le coefficient de tension de surface est fixé à $\sigma = 73.10^{-1}$ N.m⁻¹ dans le calcul. Tout comme dans les autres cas, une fraction massique minimum d'espèce de 10^{-8} est conservée en tous points du domaine. Les champs de pression et de température sont uniformes et valent $P = 1$ bar et $T = 293$ K. Les gouttes sont initialisées avec une vitesse $U = 17.4$ m.s⁻¹ dans des directions opposées de sorte qu'elles finissent par s'impacter. Le nombre de Weber défini par l'équation (4.150) vaut $We = 80$ tandis que le paramètre d'impact est nul $X = 0$ (pas de décalage vertical entre les gouttes). Le cas est simulé sur un maillage uniforme constitué de 5.7 millions de triangles équilatéraux ayant une taille caractéristique $\Delta x = 5$ μ m. Le solveur

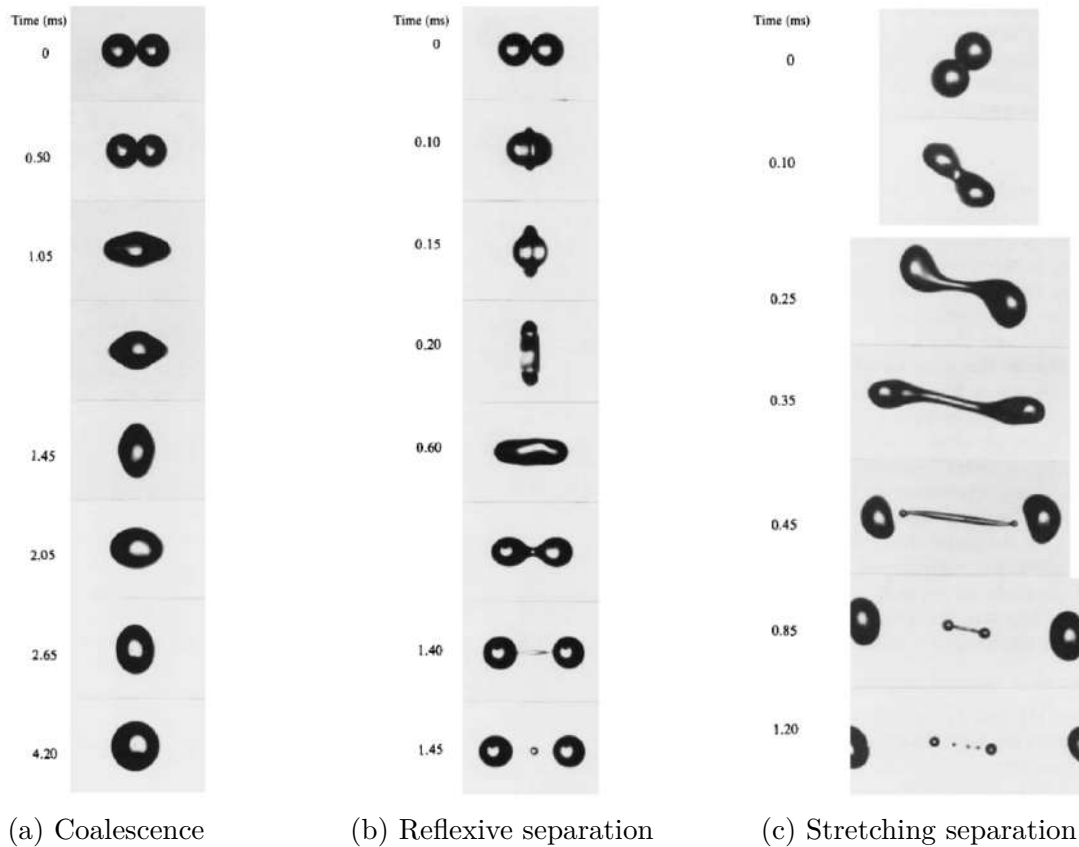


FIGURE 4.43 – Exemple de collision de deux gouttes de liquides dans les différents régimes. Ces visualisations expérimentales sont extraites de Jiang et al. (1992).

de Riemann HLLC MUSCL d'ordre 2 est utilisé avec un coefficient $\beta = 1.8$ pour le limiteur de flux. Le schéma numérique est stabilisé l'aide de la stratégie LAD présentée dans la partie 4.4.4. Le coefficient de diffusion relatif à cette stratégie vaut $C^{AD} = 0.5$. Le pas de temps de la simulation est pilotée par la contrainte $CFL = 0.7$. Les conditions aux limites sont toutes des sorties non-réfléchissantes.

La Figure 4.45 présente le résultat obtenu à différents instants du calcul. Il peut être observé que les gouttes fusionnent après impact puis forme un ligament qui s'étire dans la direction verticale. Lorsque ce ligament devient suffisamment fin, il finit par se désintégrer pour former quatre gouttes sous l'influence de la tension de surface. Le phénomène simulé ne correspond, cependant, pas au régime de "Reflexive separation" attendu pour un nombre de Weber $We = 80$ d'après la carte des régimes de collision établie par Ashgriz & Poo (1990) (Figure 4.42). En effet, bien que Ashgriz & Poo (1990) observent des cas de "Reflexive separation" où l'impact conduit à la formation de quatre gouttes, l'étirement se fait toujours dans la direction horizontale et non verticale. Cette différence est expliquée par la nature 2D du cas simulé. En effet, la suppression d'une direction a pour conséquence de supposer que le gradient de la fraction volumique de liquide est nul selon cette direction. Ceci occasionne une sous-estimation de la courbure locale κ (eq. (4.141)), et ainsi de l'intensité locale de la force de tension de surface (eq. (4.140)), par rapport à une configuration 3D. La force de tension de surface étant plus faible, elle n'amortit pas l'impact initial des gouttes aussi rapidement que dans la configuration 3D. Le ligament s'étire alors d'avantage dans la direction verticale jusqu'à s'affiner tellement qu'il se rompt

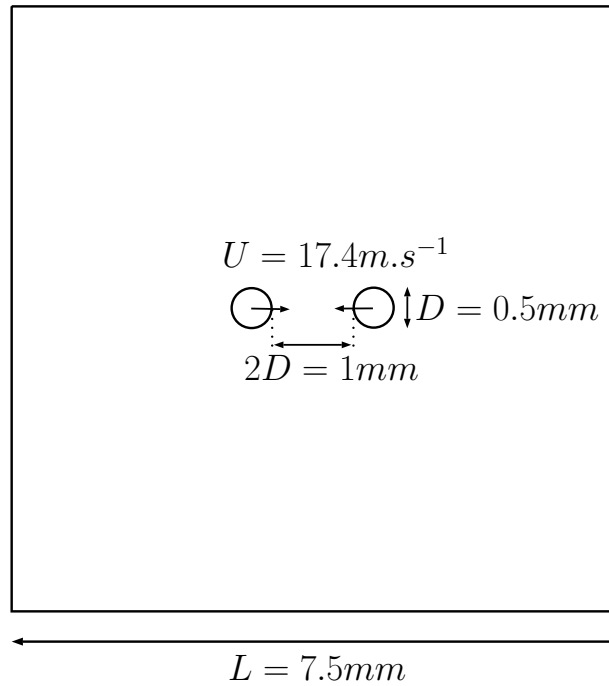


FIGURE 4.44 – Schéma du cas test de collision de deux gouttes

avant que l'impact initial n'ait été totalement amorti par la force de tension de surface. Bien que l'absence des effets 3D ne permette pas de reproduire le régime d'impact attendu, cette simulation montre la capacité de la méthode à simuler des phénomènes physiques de coalescence et de séparation d'interface liquide/gaz. Il serait, tout de même, intéressant de calculer ce cas en 3D pour vérifier la concordance des résultats avec les expériences, lorsque l'optimisation du solveur sera terminée.

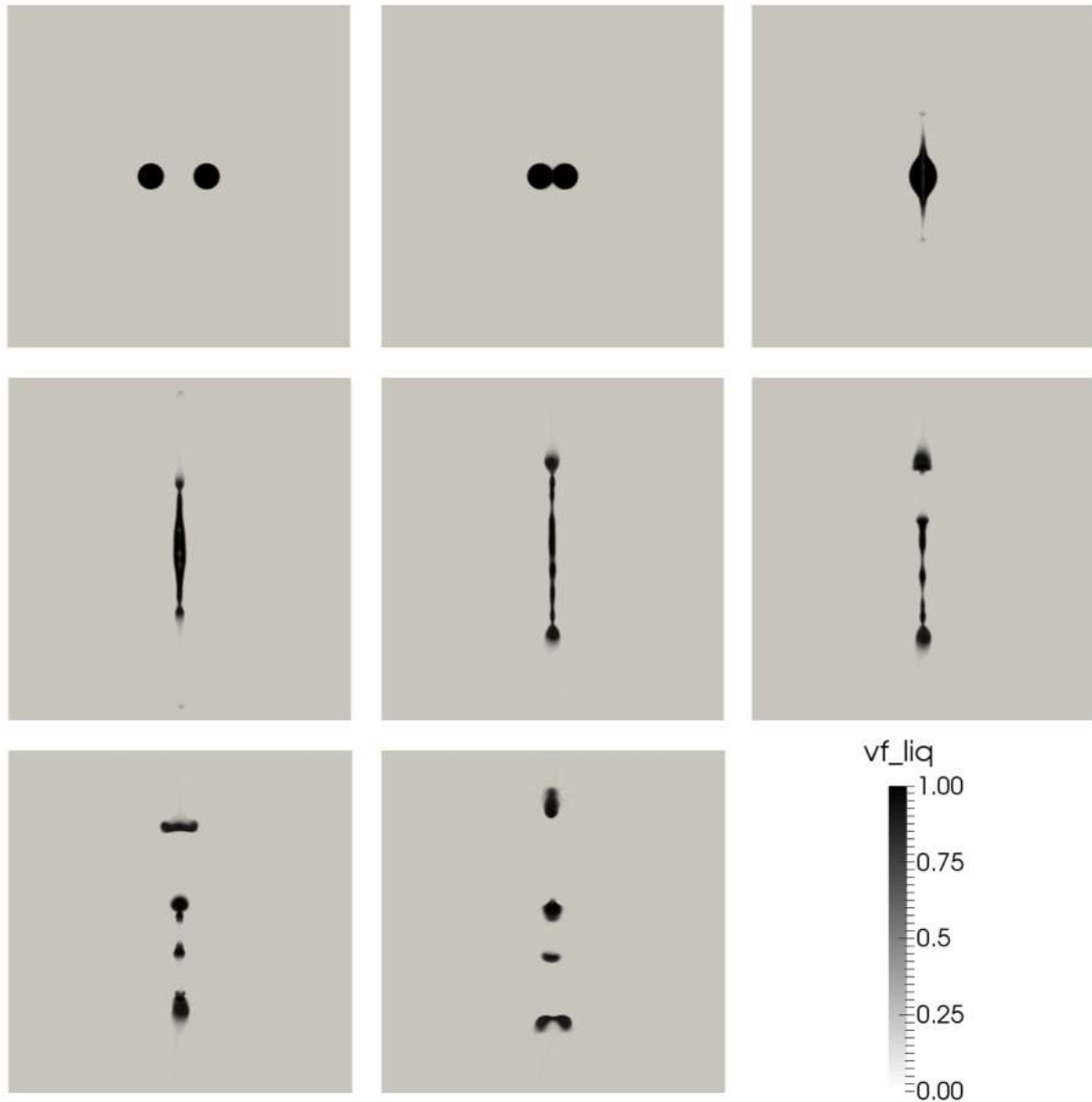


FIGURE 4.45 – Snapshots de la collision de deux gouttes à $We = 80$ simulé en 2D. `vf_liq` représente le fraction volumique de liquide.

4.8 Cas de démonstration : Vers la simulation de l’atomisation Airblast

La méthodologie développée est maintenant appliquée pour calculer des phénomènes physiques proches de ceux rencontrés dans les configurations d’injecteurs de type Airblast. Le premier cas est un film liquide 2D cisailé par un écoulement de gaz à haute vitesse représentant la configuration expérimentale de Raynal (1997). Le second cas est une configuration 2D d’atomisation Airblast où un film liquide est injecté le long d’un préfilmeur, puis, cisailé de part et d’autre par un écoulement gazeux à haute vitesse. Ce dernier cas est relativement

proche de la première configuration étudiée dans le chapitre 2. Il s'en éloigne, cependant, par son caractère purement 2D et les vitesses plus importantes choisies pour des raisons de coût de calcul.

Il convient également de noter que les simulations réalisées dans cette partie sont vouées à être améliorées. Elle sont donc à considérer comme des cas de démonstration pour illustrer le potentiel de la méthode aux interfaces diffuses et du schéma numérique développés pour simuler des configurations Airblast.

4.8.1 Cas de film liquide cisailé

La simulation de la configuration expérimentale de Raynal (1997) est décrite dans cette partie. Développée pour étudier la naissance des instabilités liées au cisaillement du liquide en atomisation assistée par air, cette expérience, illustrée en Figure 4.46, consiste à cisailier un film liquide d'eau à faible vitesse U_l à l'aide d'un écoulement d'air à haute vitesse U_g .

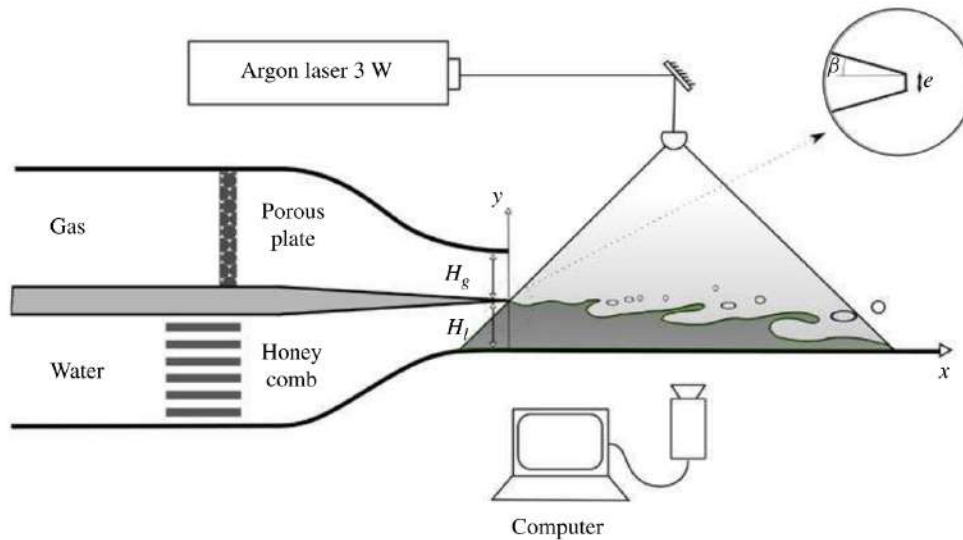


FIGURE 4.46 – Schéma de la configuration expérimentale de Raynal (1997). La figure est extraite de Fuster et al. (2013).

Les écoulements gazeux et liquide sont injectés par des canaux de hauteurs respectives $H_g = 10$ mm et $H_l = 6.4$ mm séparés par une fine plaque d'épaisseur $e = 0.2$ mm qui est biseautée avec un demi-angle $\beta = 4.15^\circ$. Le passage des écoulements dans des nids d'abeilles ou un milieu poreux ainsi que dans un convergent leur donne un caractère laminaire et bidimensionnel lorsqu'ils sont injectés dans la zone de test. Cette configuration expérimentale, notamment étudiée par Raynal (1997), Ben Rayana et al. (2006), Ben Rayana (2007) et Matas et al. (2011), voit naître une instabilité axiale de type Kelvin-Helmholtz suivie par le développement d'instabilités transverses de type Rayleigh-Taylor. La longueur d'onde et le taux de croissance de l'instabilité axiale sont pilotés par la hauteur de couche limite gazeuse δ_g au-dessus de l'interface. La longueur d'onde dominante λ_{axi} peut être prédite à l'aide d'une analyse de stabilité linéaire non-visqueuse (Marmottant & Villermaux 2004, Raynal 1997, Ben Rayana 2007, Matas et al.

2011) ce qui amène à la relation :

$$\lambda_{axi} = C_{axi} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \delta_g \quad (4.152)$$

où C_{axi} est un coefficient de proportionnalité dont la valeur est 1.6 dans cette configuration (Ben Rayana 2007). ρ_l et ρ_g correspondent respectivement à la masse volumique du liquide et du gaz. La hauteur de couche limite δ_g est estimée par la corrélation expérimentale suivante (Fuster et al. 2013) :

$$\delta_g = 5.2 \frac{H_g}{\sqrt{Re_g}} \quad (4.153)$$

où Re_g est le nombre de Reynolds de l'écoulement gazeux :

$$Re_g = \frac{\rho_g U_g H_g}{\mu_g} \quad (4.154)$$

avec μ_g la viscosité dynamique du gaz. La fréquence f_{axi} de l'instabilité axiale de longueur d'onde λ_{axi} peut théoriquement être calculée à partir de la vitesse de Dimotakis U_c (Dimotakis 1986) :

$$U_c = \frac{\sqrt{\rho_g} U_g + \sqrt{\rho_l} U_l}{\sqrt{\rho_g} + \sqrt{\rho_l}} \quad (4.155)$$

Elle est donnée par la relation :

$$f_{axi} = \frac{U_c}{\lambda_{axi}} \quad (4.156)$$

L'expérience de Raynal (1997) a déjà fait l'objet d'études numériques dans un contexte incompressible avec des méthodes VOF en 2D par Fuster et al. (2009, 2013), Agbaglah et al. (2017) et Desjardins et al. (2013), et en 3D par Chiodi & Desjardins (2017a). Bien que les instabilités transverses ne soient pas prises en compte dans les calculs 2D, l'instabilité axiale ainsi que la formation d'un coeur liquide sont bien retrouvées par les auteurs qui observent un bon accord quantitatif avec les expériences. La simulation réalisée dans cette partie est également 2D mais constitue, à la connaissance de l'auteur, la première simulation de cette configuration avec une méthode aux interfaces diffuses.

Le domaine de calcul tout comme les paramètres physiques sont largement inspirés des simulations réalisées par Fuster et al. (2013) et Agbaglah et al. (2017). Le domaine de calcul est présenté en Figure 4.47. Il a la forme d'un rectangle de dimensions $13H_l \times 8H_l$ ce qui est suffisamment grand pour éviter une éventuelle influence des conditions aux limites en haut et en sortie du domaine sur l'écoulement du film liquide. La plaque séparatrice biseautée n'est pas géométriquement modélisée dans la simulation mais son influence est prise en compte en injectant l'écoulement gazeux avec un angle $\beta = 4.15^\circ$ dans la direction du liquide. Les injections de liquide et de gaz sont également séparées par un mur non-glissant d'épaisseur $e = 0.2$ mm afin de modéliser le bout de la plaque séparatrice. Comme dans l'expériences de Raynal (1997), le liquide est de l'eau $H_2O(l)$ tandis que le gaz est de l'air représenté dans la simulation par un mélange de 22% de masse d'oxygène $O_2(g)$ et 78% d'azote $N_2(g)$. Les coefficients thermodynamiques des espèces sont dérivés selon la méthode de Boivin et al. (2019) en modifiant la vitesse du son dans le liquide pour augmenter le pas de temps. Ils sont donnés dans le Tableau 4.48. Le coefficient de tension de surface vaut $\sigma = 69.10^{-3}$ N.m⁻¹ (Agbaglah et al. 2017).

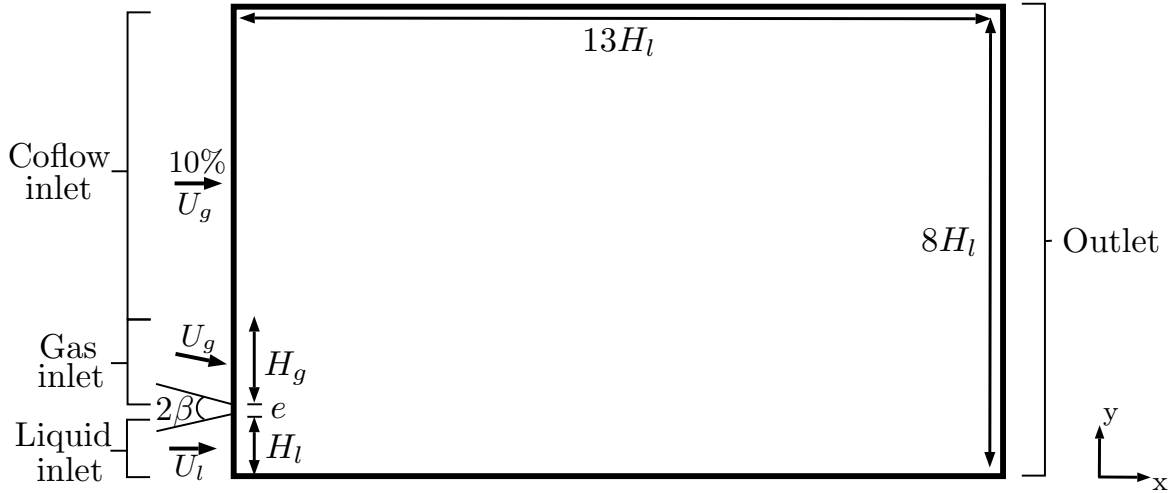


FIGURE 4.47 – Schéma du domaine de calcul utilisé pour la simulation numérique de l'expérience de Raynal (1997).

Coefficients	$H_2O(l)$	$O_2(g)$	$N_2(g)$
C_p (J/kg/K)	4185	919	1045
C_v (J/kg/K)	4180	650	743
P_∞ (Pa)	$1.027 \cdot 10^7$	0	0
q (J/kg)	$-1.143 \cdot 10^6$	$-2.104 \cdot 10^3$	$-2.355 \cdot 10^3$
b (m^3/kg)	$9.2 \cdot 10^{-4}$	0	0

FIGURE 4.48 – Coefficients thermodynamiques NASG pour les espèces $H_2O(l)$, $O_2(g)$ et $N_2(g)$ déterminés à partir d'une référence NIST (<https://www.nist.gov>) dans la gamme de température [275-475 K] et pour une pression 1bar. Les coefficients thermodynamiques pour $H_2O(l)$ correspondent à ceux donnés dans le Tableau 4.11 sous l'appellation "modified H_2O_l " dont la dérivation inclut une diminution de la vitesse du son pour augmenter le pas de temps de la simulation (voir partie 4.3.5).

A l'état initial, le domaine est intégralement rempli d'air au repos à une température $T = 300$ K et la pression est de $P = 1$ bar. L'air et l'eau sont injectés avec une température $T = 300$ K. La vitesse de l'écoulement d'air est fixée à $U_g = 20$ m.s⁻¹ tandis que la vitesse du liquide est calculée de sorte que le rapport de quantité de mouvement $M = (\rho_l U_l^2)/(\rho_g U_g^2)$ soit égal à $M = 16$. Avec, $\rho_l = 1048$ kg.m⁻³ et $\rho_g = 1.03$ kg.m⁻³ à $P = 1$ bar et $T = 300$ K, la vitesse de l'écoulement liquide vaut $U_l = 0.16$ m.s⁻¹. Comme dans la simulation de Chiodi & Desjardins (2017a), un écoulement co-courant d'air est ajouté au-dessus de l'écoulement gazeux afin de limiter l'intensité des recirculations qui peuvent physiquement apparaître dans cette zone. Sa vitesse est arbitrairement fixée à 10% de la vitesse U_g de l'écoulement d'air principal, soit 2 m.s⁻¹. Les murs en haut et en bas du domaine sont des murs glissants tandis que la condition de sortie impose une pression de 1 bar dans le domaine à l'aide d'une méthodologie NSCBC. Pour éviter tout problème lié à la sortie de l'écoulement, une zone de forte viscosité est placée en sortie de domaine. Elle s'étend sur une longueur $2H_l$ et permet de diffuser les forts gradients (notamment ceux liés à la masse volumique) avant que l'écoulement n'atteigne la condition de

sortie. Le coefficient de viscosité vaut $0.25 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ dans cette zone. Le maillage est constitué de 215 129 triangles équilatéraux d'une taille caractéristique de $\Delta x = 200 \mu\text{m}$.

La simulation est réalisée à l'aide du solveur de Riemann HLLC MUSCL d'ordre 2 avec un coefficient $\beta = 1.5$ pour le limiteur de flux. La stratégie LAD, présentée dans la partie 4.4.4, est également utilisée pour stabiliser le schéma numérique. Le coefficient de diffusion est fixé à $C^{AD} = 0.5$. Le pas de temps de la simulation est piloté par une contrainte de $CFL = 0.4$. La dynamique de l'interface étant très lente, ce cas est particulièrement sensible aux problèmes de diffusion excessive de l'interface. Afin de limiter au maximum ce phénomène, la diffusion des espèces n'est pas considérée dans le calcul. De plus, aucune stratégie de modélisation de la turbulence en sous-maille n'est utilisée dans la simulation. En effet, il a été observé que le cisaillement important de l'interface par le gaz engendre la prédiction par les modèles de sous-maille d'une viscosité turbulente importante. Ceci a pour conséquence d'accroître sensiblement le phénomène de diffusion de l'interface. Bien que l'influence de la turbulence de sous-maille soit ici négligée, des travaux pourront être conduits dans le futur pour développer un modèle compatible avec l'approche aux interfaces diffuses. Le temps physique simulé est de 1 s permettant un bon établissement de la dynamique du film puis, l'apparition d'un nombre de vagues d'instabilité suffisant pour extraire des statistiques. Le coût de calcul est de 19 000 heures.

La Figure 4.49 présente une visualisation instantanée de la fraction volumique de liquide après 1 s de calcul. Il convient d'observer que la méthodologie aux interfaces diffuses est capable

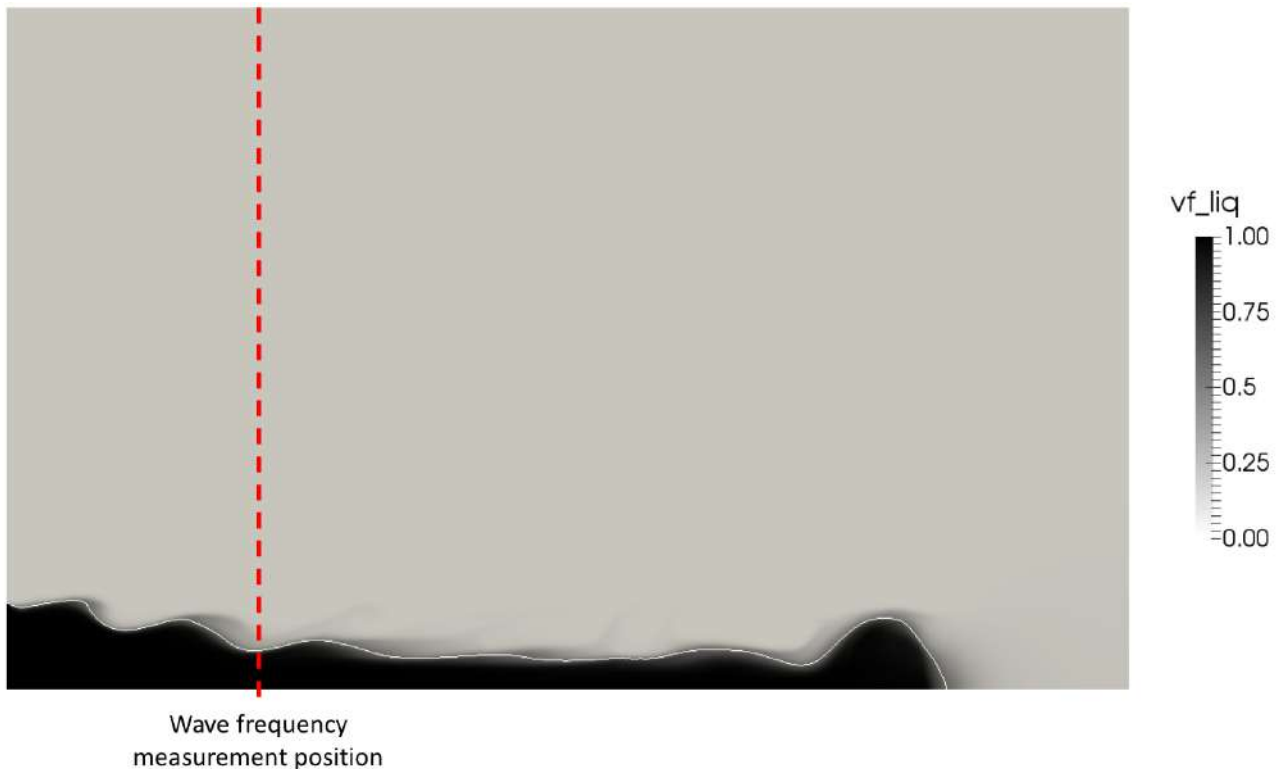


FIGURE 4.49 – Visualisation instantanée du film liquide après 1 s de temps de simulation. vf_liq représente le fraction volumique de liquide. La ligne blanc correspond à l'isocontour $vf_liq = 0.5$ tandis que la ligne rouge en pointillé donne la position d'enregistrement de la hauteur du film liquide pour la mesure de la fréquence de l'instabilité axiale.

de prédire le comportement du film liquide. En effet, des vagues d'instabilité apparaissent bien

à la surface du film liquide puis s'écoulent dans la direction axiale vers la sortie. Conformément aux observations expérimentales, la hauteur du film liquide diminue sous l'influence du cisaillement gazeux puis, se stabilise après avoir parcouru environ un tiers du domaine de calcul. L'influence de la zone de forte viscosité en sortie est également clairement observable sur cette visualisation. Elle se manifeste par une disparition quasi-totale de la fraction volumique de liquide causée par la diffusion importante de la phase liquide. Comme évoqué précédemment, ceci permet d'assurer une bonne stabilité numérique de la condition de sortie en diffusant notamment le gradient de masse volumique. Cette stratégie semble en revanche engendrer l'apparition d'une vague non-physique en amont de la zone. Cette vague dévie légèrement l'écoulement gazeux mais n'affecte pas le comportement du film liquide, et en particulier son établissement, en amont de celle-ci.

L'évolution de la hauteur du film liquide entre l'entrée du domaine et sa stabilisation a fait l'objet d'une caractérisation expérimentale. Raynal (1997) et Ben Rayana (2007) ont ainsi montré qu'elle suit une droite qui donne une hauteur de film liquide nulle pour une longueur L après l'injection. Cette longueur, appelée longueur de dard liquide, dépend de l'intensité de l'entraînement du film liquide par l'écoulement gazeux décrit par le rapport de quantité des mouvements $M = (\rho_l U_l^2)/(\rho_g U_g^2)$. Elle est donnée par la corrélation expérimentale suivante (Raynal 1997) :

$$L = \frac{12H_l}{M^{0.5}} \quad (4.157)$$

La Figure 4.50a fournit l'évolution spatiale de la hauteur de film dans le calcul sur une distance de $3.5H_l$ après l'entrée du domaine en dix instants répartis uniformément entre les temps physiques 0.9 s et 1 s. La hauteur du film liquide est arbitrairement calculée à partir de la position de l'isocontour de fraction volumique $vf_liq = 0.5$ ce qui correspond à la valeur médiane cette quantité. Figure 4.50a montre que la hauteur du film diminue bien en suivant la pente théorique (line rouge) avant de se stabiliser à une hauteur d'environ $0.4H_l$ après une longueur axiale $x \approx 1.75H_l$. Ce résultat est en très bon accord qualitatif et quantitatif avec le graphique donné en Figure 4.50b obtenu par Agbaglah et al. (2017) à partir d'un calcul 2D avec une approche VOF.

La fréquence de l'instabilité axiale est extraite de la simulation en enregistrant l'évolution de la hauteur de film au cours du temps à une position axiale $x = 3H_l$ puis, en réalisant une transformation de Fourier (FFT) sur le signal obtenu. Comme précédemment, la hauteur du film liquide est arbitrairement calculée à partir de la position de l'isocontour de fraction volumique $vf_liq = 0.5$. Cet isocontour est tracé à titre d'exemple en blanc sur la Figure 4.49. La position de la mesure y est également matérialisée par une ligne rouge en pointillés. L'enregistrement du signal est débuté après un temps physique de 0.55 s et se poursuit jusqu'à la fin de la simulation à 1 s. La fréquence d'acquisition est de 2000 Hz. La Figure 4.51 donne le résultat de la FFT. La fréquence de l'instabilité axiale prédite par la simulation correspond à la fréquence dominante dans le spectre. Elle vaut 73 Hz. Cette valeur est environ 2.4 fois supérieur à la fréquence théorique de 30 Hz déterminée à l'aide de l'équation (4.156). La cause de cet écart important n'a pour l'heure pas été formellement identifié mais certaines pistes existent pour l'expliquer. La première piste consiste à incriminer le profil de vitesse de l'écoulement gazeux imposé en entrée du domaine. Les analyses de stabilité linéaire réalisées par Raynal (1997), Ben Rayana (2007) ou encore Matas et al. (2011) ont en effet montré que la fréquence de l'instabilité est fortement lié à la forme de ce profil. La simulation actuelle imposant un profil plat en entrée, l'utilisation d'un profil plus proche de l'expérience pourrait donc améliorer la prédiction de la

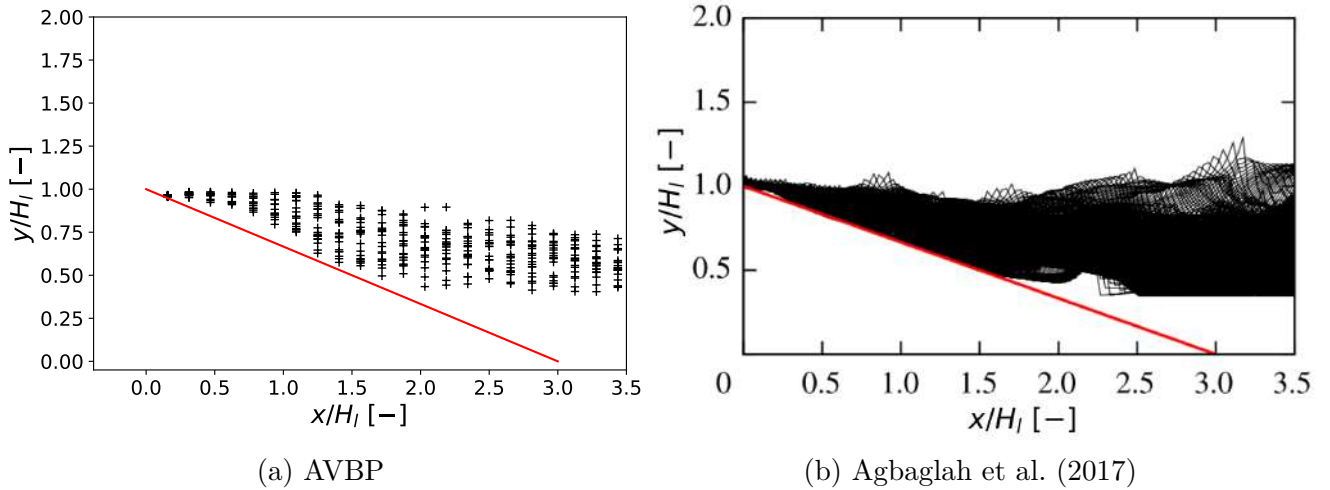


FIGURE 4.50 – Comparaison de l'évolution spatiale de la hauteur du film liquide en dix instants répartis uniformément entre les temps physiques 0.9 s et 1 s (croix noire) avec la droite d'évolution théorique donnée par l'équation (4.157) (ligne rouge). La figure de gauche présente le résultat obtenu avec AVBP tandis que celle de droite donne le résultat de Agbaglah et al. (2017) issu d'une simulation avec une approche VOF.

fréquence. Une autre piste porte sur la modélisation de l'interface par une zone diffuse au lieu d'une discontinuité. L'existence d'un profil de vitesse non-discontinu dans la zone d'interface pourrait impacter la fréquence des instabilités axiales. Ces pistes mériteraient d'être explorées dans de futurs travaux.

La simulation de la configuration expérimentale de Raynal (1997) a montré la capacité de la méthode aux interfaces diffuses à reproduire qualitativement le comportement d'un film liquide cisailé. Si la diminution de la hauteur du film liquide sous l'influence du cisaillement gazeux est bien prédit par le calcul, la fréquence des instabilités axiales est cependant surestimée par rapport à la prédiction théorique et des travaux pourront être conduits par la suite pour identifier les raisons de cette différence et, résoudre ce problème. Malgré cela, les premiers résultats obtenus sur ce type de configuration sont très encourageant en vue de l'utilisation future de cette méthode pour simuler des injecteurs de type Airblast.

4.8.2 Atomisation Airblast avec préfilmur

La méthodologie développée est maintenant appliquée pour calculer un processus d'atomisation Airblast avec préfilmur. Cette simulation se présente comme un calcul de démonstration permettant d'illustrer le potentiel de cette méthode pour simuler ce type de configuration. Le domaine de calcul est représenté dans la Figure 4.52. Il prend la forme d'un rectangle de 200×212.5 mm dans lequel est placé un préfilmur de 25 mm de longueur et 12.5 mm d'épaisseur. Un film liquide constitué d'eau $H_2O(l)$ est injecté avec une vitesse $U_l = 5.5 \text{ m.s}^{-1}$ le long de ce dernier. Le préfilmur et le film liquide sont entourés par un écoulement gazeux avec une vitesse $U_g = 50 \text{ m.s}^{-1}$. Les patches d'injection de liquide et de gaz sont séparés par une fine lèvre de 1.25 mm de longueur et 0.125 mm d'épaisseur afin de prévenir tout problème numérique lié à une interaction entre les deux phases au niveau des conditions d'entrée. Le gaz est de l'air représenté par un mélange multiespèces de 22% de masse d'oxygène $O_2(g)$ et 78% d'azote $N_2(g)$.

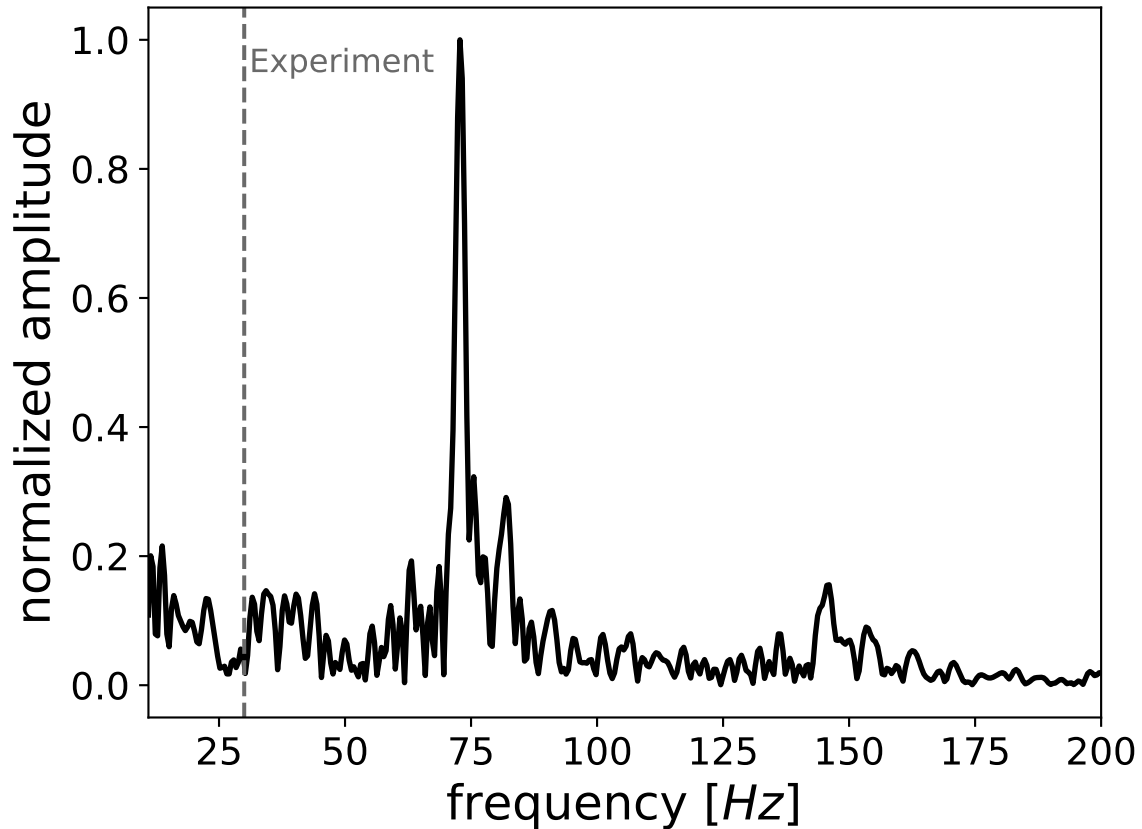


FIGURE 4.51 – Spectre de fréquences obtenu en appliquant une transformation de Fourier (FFT) au signal d'évolution de la hauteur de film au cours du temps enregistré à une position axiale $x = 3H_l$. La ligne en pointillée donne la position de la fréquence théorique de l'instabilité axiale dominante déterminée à l'aide de l'équation (4.156).

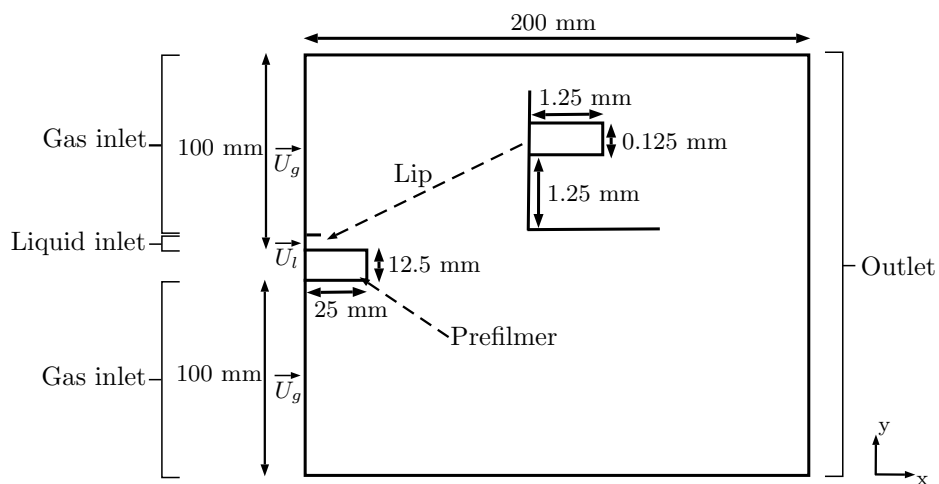


FIGURE 4.52 – Schéma du cas d'atomisation Aiblast avec préfilmeur.

Les coefficients thermodynamiques sont les mêmes que ceux utilisés dans la partie précédente et sont donnés dans le Tableau 4.48. Ils incluent une modification de la vitesse du son dans le

liquide pour augmenter le pas de temps. Le coefficient de tension de surface du liquide vaut $\sigma = 73.10^{-3} \text{ N.m}^{-1}$. La simulation se déroule à une température de $T = 298 \text{ K}$ et une pression de $P = 1 \text{ bar}$. Les conditions aux limites des entrées de l'écoulement gazeux et de la sortie du domaine sont imposées via le formalisme NSCBC tandis que l'écoulement liquide est imposé via une condition de type Dirichlet. Les parois du préfilmeur ainsi que le haut et le bas du domaine de calcul sont considérés comme des murs glissants. Le maillage est constitué de 9 158 204 triangles. La zone d'intérêt, comprenant une large région autour du préfilmeur ainsi que la région en aval, est discrétisée avec des éléments ayant une taille caractéristique de $\Delta x = 30 \mu\text{m}$ ce qui correspond à 40 éléments dans la hauteur du film liquide. Le maillage est, ensuite, progressivement déraffiné hors de cette zone pour atteindre une taille caractéristique $\Delta x = 1.5 \text{ mm}$ au niveau des parois haute et basse du domaine.

La simulation est exécutée en utilisant le schéma numérique de Godunov avec le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'ordre 2. Le coefficient du limiteur de flux de la méthodologie MUSCL est fixé à $\beta = 1.75$. Comme dans les calculs précédents, la stratégie LAD, présentée dans la partie 4.4.4, est appliquée pour stabiliser le schéma numérique. Son coefficient de diffusion est fixé à $C^{AD} = 2.0$. Le pas de temps est piloté par une contrainte de $CFL = 0.75$. Contrairement aux configurations précédemment étudiées, les vitesses en jeu dans cette configuration sont importantes. La diffusion des espèces n'affecte donc pas la dynamique de l'interface à l'ordre 1 et peut donc être conservée dans la simulation. Aucun modèle de turbulence n'est cependant activé.

Un temps physique de simulation de 39 ms est réalisé correspondant à un coût de calcul de 100 000 heures. La Figure 4.53 présente des visualisations instantanées entre 35 ms et 39 ms. Il peut, tout d'abord, être observé que le film liquide ne s'accumule pas au niveau la lèvres

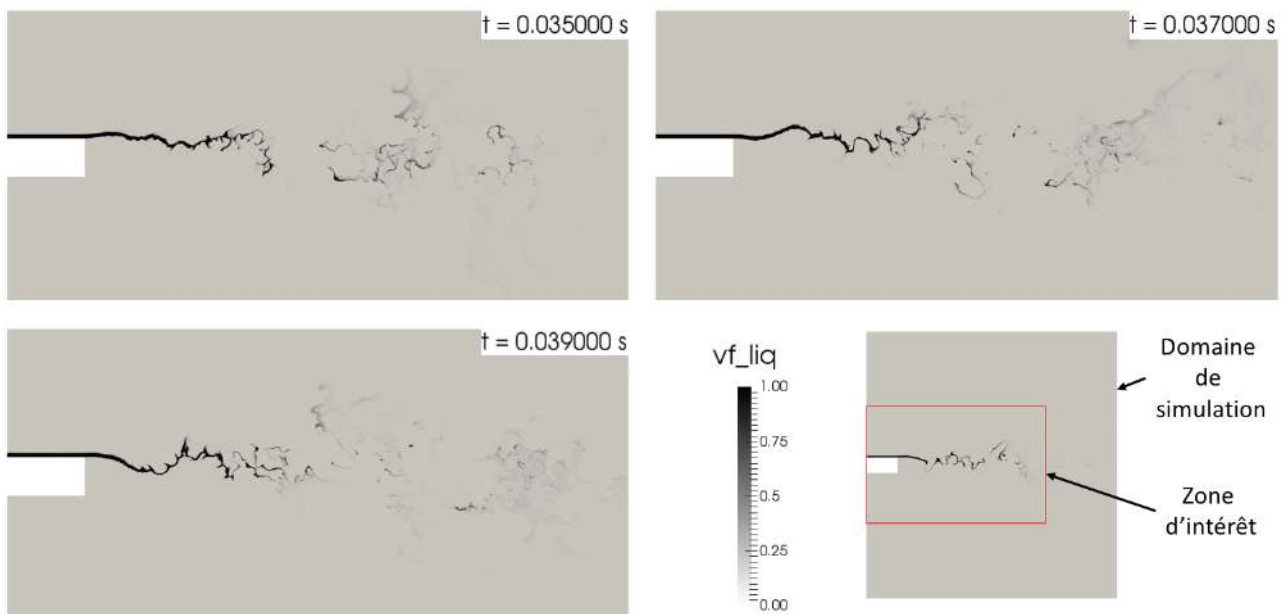


FIGURE 4.53 – Snapshots présentant la dynamique de la phase liquide dans la configuration d'atomisation Airblast avec préfilmeur après 35 ms, 37 ms et 39 ms de temps physique. La quantité vf_liq visualisée correspond à la fraction volumique de liquide. Afin de faciliter l'observation, les images sont zoomées sur une zone d'intérêt du domaine de simulation.

du préfilmé, comme c'est le cas dans le calcul réalisé avec le code NGA dans le chapitre 2, mais forme une nappe en aval du préfilmé. Ce comportement est attribué à une plus grande vitesse du film liquide et peut être vérifié en appliquant le modèle de Friedrich et al. (2008) à la configuration. Détaillé dans la partie 2.6, ce modèle prédit le détachement ou non d'un film liquide en bout de préfilmé en fonction du ratio de forces FR (eq. (2.24)) entre les forces d'inertie du film liquide et les forces qui tendent à le stabiliser le long du préfilmé. En l'absence de gravité, le ratio de force vaut ici :

$$FR = \frac{\rho_l U_l^2 h_f}{2\sigma} = 2366 \quad (4.158)$$

où $h_f = 1.25$ mm est la hauteur de film et, la masse volumique ρ_l et la vitesse U_l du liquide sont égales aux valeurs imposées à l'entrée du domaine. Le ratio de forces étant très largement supérieur à l'unité, le détachement du film liquide en bout de préfilmé prédit par la simulation est conforme à la théorie.

La nappe liquide créée en aval du préfilmé par le détachement du film est, ensuite, déstabilisée sous l'influence de l'écoulement gazeux et, entre dans une dynamique de battement qui est bien observable sur la Figure 4.53. La combinaison du battement ainsi que des destabilisations qui apparaissent à la surface de la nappe liquide conduit, finalement, à sa désintégration en ligaments. Contrairement à ce qui pourrait être attendu, les ligaments ne se désintègrent pas en gouttes clairement définies mais semble plutôt se diffuser dans l'écoulement. Cette diffusion met en lumière une limitation de la méthodologie implémentée. En effet, malgré l'utilisation d'un schéma numérique capable de transporter de forts gradients, rien ne garantit la conservation de l'épaisseur de l'interface au cours du transport. Or, la dynamique de l'écoulement et, notamment le cisaillement gazeux, tend à altérer les gradients dans la zone d'interface ce qui engendre un épaississement progressif de l'interface et donc, une diffusion des structures. Ce phénomène pourrait, cependant, être évité par l'implémentation dans l'avenir d'une méthodologie de raidissement d'interface à l'image de celle proposée pour la méthode aux interfaces diffuses de Jain et al. (2020). Malgré cette diffusion, les résultats obtenus lors de ce premier calcul d'atomisation Airblast montrent bien la capacité de la méthodologie à prédire au moins qualitativement la dynamique et la désintégration d'une nappe liquide et, illustrent son potentiel pour calculer ce type de configuration.

4.9 Conclusion et travaux futurs

Les développements réalisés pour doter le code AVBP d'une méthodologie diphasique basée sur une approche multfluides aux interfaces diffuses ont été exposés dans ce chapitre. Cette méthodologie combine trois éléments : un système d'équations, une fermeture thermodynamique spécifique et un schéma numérique capable de gérer les forts gradients dans la zone d'interface liquide/gaz. Une revue de la littérature nous a conduit à choisir le modèle à 4 équations, qui représente la dynamique d'un écoulement multiphasique par un système d'équations similaire aux équations d'Euler, en raison de son intégration directe dans le solveur AVBP et son couplage aisé à venir avec des modèles de combustion. La fermeture thermodynamique Noble-Able-Stiffened-Gas (NASG) a ensuite été implémentée afin de décrire le comportement des fluides à la fois en phase liquide et en phase gazeuse. Le temps caractéristique des phénomènes hydrodynamiques étudiés dans cette thèse étant très faible devant la vitesse des ondes acoustiques, l'utilisation de cette fermeture thermodynamique a, également, offert la possibilité

de dériver une méthode pour augmenter le pas de temps dans les simulation. Cette dernière consiste en une simple modification des coefficients thermodynamiques de la loi d'état NASG pour diminuer artificiellement la vitesse du son dans le liquide tout en conservant l'évolution des grandeurs thermodynamiques dans le fluide. La nécessité d'éviter la diffusion numérique des forts gradients au niveau de l'interface en assurant la stabilité du calcul a, finalement, encouragé le développement dans le code AVBP d'un schéma numérique de Godunov basé sur une résolution des problèmes de Riemann par un solveur HLLC et adapté à une formulation "Node-centered". Un important travail algorithmique a, en particulier, été réalisé pour implémenter une méthodologie de reconstruction MUSCL dans un contexte parallèle et ainsi, monter la précision du schéma à l'ordre deux. Ce schéma numérique spatial a ensuite été couplé avec le schéma temporel de deuxième ordre de Runge-Kutta à trois étapes. La nouvelle méthode numérique a ensuite fait l'objet d'une validation sur un cas 1D de tube à choc puis, sur un cas de Riemann 2D montrant un très bon accord des résultats avec la littérature. La réalisation d'un cas 2D de convection de vortex isentropique a également permis de retrouver l'ordre 1 attendu pour un schéma de Godunov utilisant le solveur de Riemann HLLC sans méthodologie de reconstruction MUSCL ainsi que, l'ordre 2 lorsque cette dernière méthodologie est activée. La nouvelle méthode numérique étant validée, le calcul des termes diffusifs (viscosité, diffusion des espèces, conduction thermique) et, l'ajout de leurs contributions dans le modèle à 4 équations ont ensuite été discutés. Puis, une méthode pour prendre en compte la force de tension de surface a été décrite et validée grâce à trois cas tests 2D diphasiques. Le premier cas test a montré la capacité du solveur à prédire la surpression donnée par la loi de Laplace dans une goutte à l'équilibre. Le second cas test a permis de retrouver une fréquence d'oscillation en bon accord avec la théorie pour une goutte de forme elliptique lâchée dans un écoulement au repos. Le troisième cas test a consisté à étudier la collision de deux gouttes. Ce cas test étant pour l'heure limité à une étude 2D pour des raisons d'optimisation du solveur, le régime de séparation observé expérimentalement n'a pu être retrouvé. Cependant, ce cas a permis de montrer la capacité de la méthode à simuler des phénomènes de coalescence et de séparation d'interface liquide/gaz. La méthodologie aux interfaces diffuses développée a pour finir été appliquée pour réaliser les simulations 2D d'un film liquide cisailée et d'un processus d'atomisation Airblast avec préfilmur. Bien que perfectibles, les premiers résultats obtenus soulignent la capacité de la méthode à simuler des phénomènes proches de ceux rencontrés dans les configurations d'injecteurs de type Airblast.

Les perspectives d'amélioration sont nombreuses à partir des bases développées durant cette thèse. Le schéma numérique de Godunov devra, notamment, être optimisé pour permettre l'accès à des cas 3D. Une attention particulière pourra, également, être accordée aux modélisations de la turbulence non-résolue et de la diffusion des espèces qui engendre actuellement une diffusion de l'interface sur des cas à faibles vitesses. Le développement d'un modèle de raidissement permettrait aussi d'éviter la diffusion non-physique des gradients dans l'interface au cours du temps. Enfin, l'implémentation d'un modèle d'évaporation de la phase liquide offrirait la possibilité de simuler des problèmes de combustion diphasique. Un premier modèle, basé sur les travaux de Chiapolino et al. (2017), a déjà été implémenté mais n'a pour l'heure été validé que sur des cas 1D (voir annexe B).

Au delà des applications de cette thèse, les développements réalisés ouvrent de nouveaux champs d'applications au code AVBP. En particulier, le schéma numérique de Godunov devrait permettre d'améliorer grandement le traitement de problèmes physiques en présence de chocs comme les cas d'explosion. La méthodologie aux interfaces diffuses offre, quant à elle, non-

seulement la possibilité de simuler des configurations à basse-vitesse comme celles de cette thèse mais, aussi des problèmes à hautes vitesses et/ou à fortes pressions. La Figure 4.54 fournit un exemple de premiers résultats obtenus sur une configuration de ce type.



(a) AVBP



(b) Chiapolino et al. (2017)

FIGURE 4.54 – Fragmentation d’un jet d’oxygène liquide par un écoulement coaxial d’azote à haute vitesse issu de Chiapolino et al. (2017).

Chapitre 5

Conclusion générale

Ce travail de thèse a pour objectif d'étudier les phénomènes physiques en jeu dans les injecteurs de type Airblast avec préfilmeur et de développer des outils numériques pour faciliter leur caractérisation. Pour répondre à cette problématique, celui-ci s'est articulé selon trois axes correspondant à trois approches de modélisations différentes.

Le premier axe a consisté à réaliser des simulations numériques haute fidélité pour étudier la dynamique d'écoulement du film liquide et d'atomisation primaire dans deux configurations académiques d'injecteurs de type Airblast avec préfilmeur. Bien que ce type de simulation constitue un outil très intéressant pour analyser finement les phénomènes physiques, les coûts de calcul associés sont bien souvent rédhibitoires avec les moyens de calcul actuels. La première partie du travail a donc consisté à développer une stratégie permettant de reproduire fidèlement l'écoulement du film liquide et des processus d'atomisation primaire tout en conservant un coût de calcul acceptable. Cette dernière est basée sur l'hypothèse que la conservation du rapport des flux de quantité de mouvement, d'un nombre de Weber basé sur la hauteur de film liquide ainsi que des rapports des viscosités dynamiques et des masses volumiques suffit pour décrire ces phénomènes physiques. L'échelle de longueur visqueuse δ_v est alors légèrement augmentée ce qui diminue le nombre de Reynolds de l'écoulement gazeux et réduit le coût de calcul nécessaire pour réaliser la simulation numérique directe de la turbulence dans l'écoulement gazeux. Cette stratégie a, ensuite, été appliquée pour simuler la configuration expérimentale de Gepperth et al. (2012) constituée d'un préfilmeur sur lequel se développe un film liquide entouré d'un écoulement gazeux à haute vitesse. Les résultats obtenus se sont montrés en très bon accord avec les expériences, permettant non-seulement de valider notre stratégie de calcul mais aussi d'étudier les phénomènes physiques en jeu dans ce type de configuration. La géométrie du préfilmeur a, par la suite, été modifiée pour simuler une configuration de marche. Après une validation du processus d'atomisation primaire avec la littérature, ce dernier a été comparé à celui observé dans la configuration de Gepperth et al. (2012). Cette analyse a mis en lumière l'impact important de la géométrie du préfilmeur sur le phénomène d'atomisation primaire. En particulier, il a été constaté que l'absence d'écoulement en dessous du préfilmeur dans le cas de la marche est à l'origine d'une disparition du phénomène d'atomisation par formation de sac de liquide ("bag breakup") et, d'une diminution de l'étirement des ligaments conduisant à une fragmentation du liquide en gouttes plus grosses. En outre, contrairement à la configuration de Gepperth et al. (2012), où la formation d'un réservoir de liquide au niveau du bord du préfilmeur décorrèle la survenue des événements d'atomisation primaire de la dynamique du film liquide, l'apparition de l'atomisation dans la configuration de marche est directement liée

à l'arrivée d'une instabilité primaire du film au niveau du bord d'atomisation.

Le second axe de ce travail de thèse s'est concentré sur le développement d'une approche faiblement coûteuse pour permettre le calcul d'un spray dans une configuration industrielle d'injecteur de type Airblast avec préfilmeur. Elle se base sur une représentation Lagrangienne de la phase liquide ainsi que sur un ensemble de modèles phénoménologiques qui offrent une description simple des phénomènes tels que la traînée des gouttes du spray, leur rétro-action sur la phase gazeuse, l'écoulement du film liquide, l'atomisation secondaire des gouttes ou encore l'atomisation primaire du liquide au niveau de la lèvre du préfilmeur. Une attention particulière a été portée à la modélisation de ce dernier phénomène. Après une discussion autour des différents modèles phénoménologiques disponibles dans la littérature, le modèle Automatic-PAMELA a été développé, calibré puis, validé sur la configuration académique de Gepperth et al. (2012). Ce modèle se présente comme une extension du modèle PAMELA de Chaussonnet et al. (2013), Chaussonnet (2014), Chaussonnet et al. (2016) qui, grâce à une expression locale et une détermination automatique de toutes les grandeurs d'entrée, rend possible la simulation de configurations complexes. L'approche phénoménologique a ensuite été utilisée pour simuler un injecteur aéronautique de type Airblast avec préfilmeur. Une comparaison avec des mesures expérimentales issues d'une analyse PDPA a démontré la capacité de la méthode à prédire la taille caractéristique des gouttes ainsi que leurs dynamiques dans le spray.

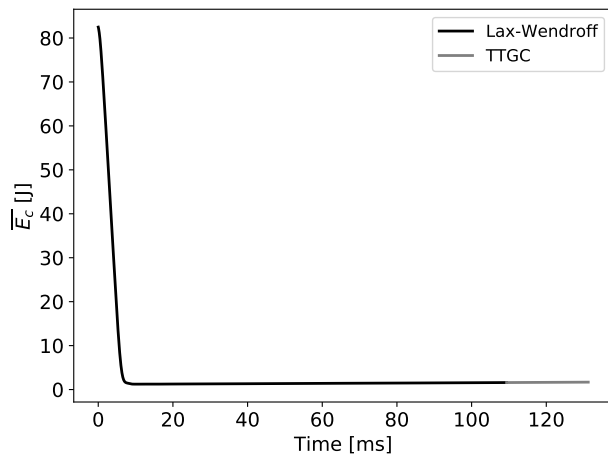
Le troisième, et dernier, axe de ce travail de thèse avait pour objectif de doter le code compressible AVBP d'une méthodologie générique capable de traiter tous les types d'écoulements liquide-gaz sans connaissance a priori des phénomènes physiques en jeu. La méthode choisie se base sur une approche multfluides aux interfaces diffuses. Son développement a nécessité un travail autour de trois éléments : la définition d'un système d'équations, l'implémentation d'une fermeture thermodynamique spécifique et le développement d'un schéma numérique capable de gérer les forts gradients dans la zone d'interface liquide/gaz. Un système à 4 équations, dont la formulation est proche des équations d'Euler, a tout d'abord été sélectionné pour décrire l'écoulement multiphasique. Sa facilité d'intégration dans le code AVBP ainsi que la possibilité dans le futur de le coupler avec des modèles de combustion sont les raisons principales qui ont motivé ce choix. La fermeture thermodynamique Noble-Able-Stiffened-Gas (NASG) a ensuite été implémentée pour décrire le comportement des fluides à la fois en phase liquide et en phase gazeuse. La nécessité d'éviter la diffusion numérique des forts gradients au niveau de l'interface tout en assurant la stabilité des calculs a, finalement, encouragé le développement dans le code AVBP d'un schéma numérique de Godunov. Après un important travail algorithmique pour implémenter une méthode de reconstruction MUSCL dans un contexte parallèle, ce schéma numérique spatial a été couplé avec un schéma temporel de Runge-Kutta à trois étapes puis, a fait l'objet de validations sur des cas 1D et 2D. Les termes diffusifs (viscosité, diffusion des espèces, conduction thermique) ainsi que la force de tension surface ont ensuite été ajoutés au système d'équations puis, validés à l'aide de trois cas tests 2D diphasiques. La méthodologie aux interfaces diffuses a, pour finir, été utilisée pour réaliser des simulations 2D d'un film liquide cisailé et d'un processus d'atomisation Airblast avec préfilmeur. Bien que perfectibles, les premiers résultats obtenus soulignent la capacité de la méthode à simuler des phénomènes proches de ceux rencontrés dans les configurations d'injecteurs de type Airblast avec préfilmeur.

Finalement, les trois approches de modélisation proposées dans cette thèse forment un ensemble d'outils complémentaires pour caractériser les injecteurs de type Airblast avec préfilmeur selon le degré de précision nécessaire. Ainsi, l'approche haute fidélité paraît particulièrement adaptée pour résoudre des problèmes de conceptions fines comme, par exemple, l'optimisation

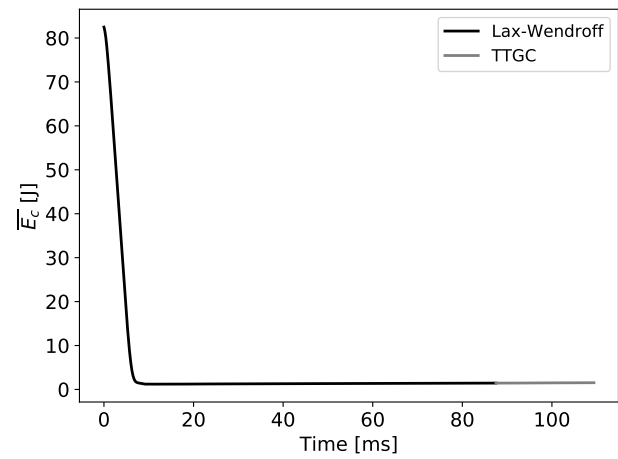
de l'épaisseur de la lèvre du préfilmeur en fonction des caractéristiques du spray souhaitées. L'approche phénoménologique, qui ne permet pas de réaliser des simulations avec une telle précision, tire cependant avantage de son faible coût qui offre la possibilité de l'utiliser dans des configurations complexes. Elle pourra être adoptée dans l'avenir pour caractériser d'autres injecteurs industriels voire être intégrée dans un calcul complet de chambre de combustion. Toute la chaîne de phénomènes allant de l'injection du carburant à sa combustion pourra ainsi être modélisée dans un même calcul, permettant notamment d'observer les interactions entre la flamme et le spray. L'approche aux interfaces diffuses constitue, quant à elle, un outil très intéressant. D'un côté, elle offrira la possibilité de réaliser des simulations haute fidélité d'atomisation dans des configurations simples tout en y incluant des phénomènes physiques tels que l'évaporation des gouttes et la combustion du carburant. Tandis que d'un autre côté, elle permettra de développer une approche hybride dans laquelle l'atomisation primaire du liquide sera simulée par l'approche aux interfaces diffuses puis, les structures formées seront transformées en gouttes Lagrangiennes pour limiter le coût des calculs. Cette stratégie permettra ainsi d'obtenir un outil générique, et notamment non dépendant du choix d'un modèle phénoménologique d'atomisation primaire, pour caractériser finement des injecteurs tout en conservant un coût de calcul raisonnable. Pour atteindre ces objectifs, certaines améliorations devront cependant être réalisées à court terme. Tout d'abord, le fonctionnement en parallèle de l'algorithme du schéma numérique de Godunov devra être optimisé pour pouvoir réaliser des cas 3D pour un coût de calcul acceptable. Une méthode devra, ensuite, être développée pour limiter la diffusion de l'interface, notamment dans les cas impliquant de faibles vitesses d'advection de l'interface. Un travail spécifique sera notamment nécessaire pour améliorer la modélisation de la turbulence non-résolue et de la diffusion des espèces dans la zone d'interface. Enfin, il faudra poursuivre le développement d'un modèle pour tenir compte de l'évaporation de la phase liquide vers la phase gazeuse.

Annexe A

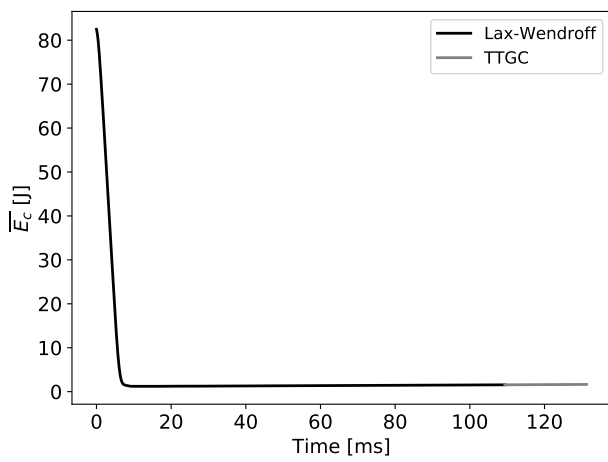
Convergence de l'énergie cinétique
dans les calculs sur la configuration de
Gepperth et al. (2012)



(a) Maillage grossier

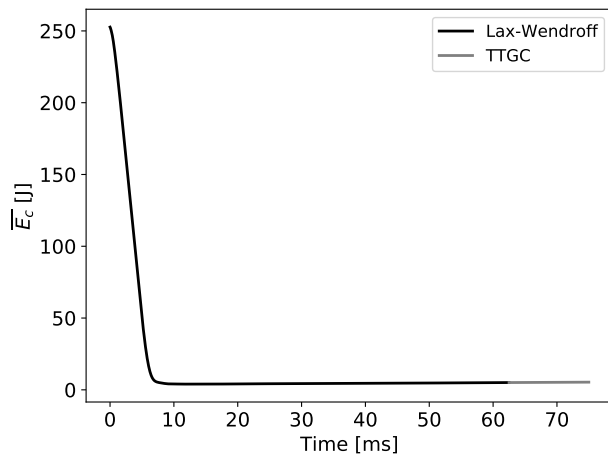


(b) Maillage moyen

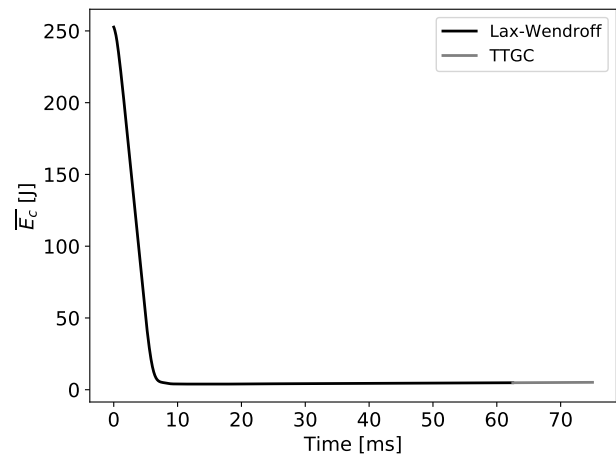


(c) Maillage fin

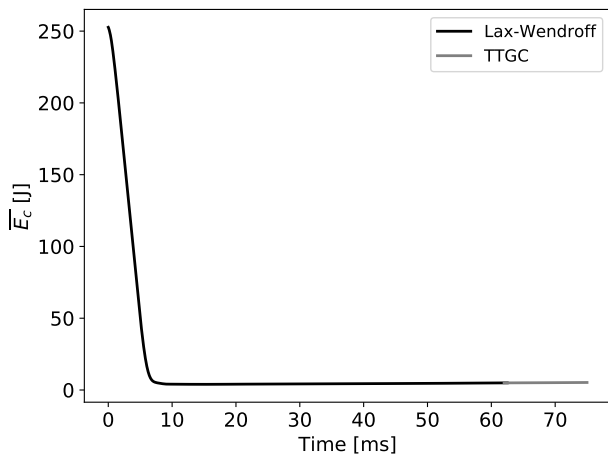
FIGURE A.1 – U40



(a) Maillage grossier



(b) Maillage moyen



(c) Maillage fin

FIGURE A.2 – U70

Annexe B

**Courbes de validation 1D de
l'algorithme d'évaporation de
Chiapolino et al. (2017)**

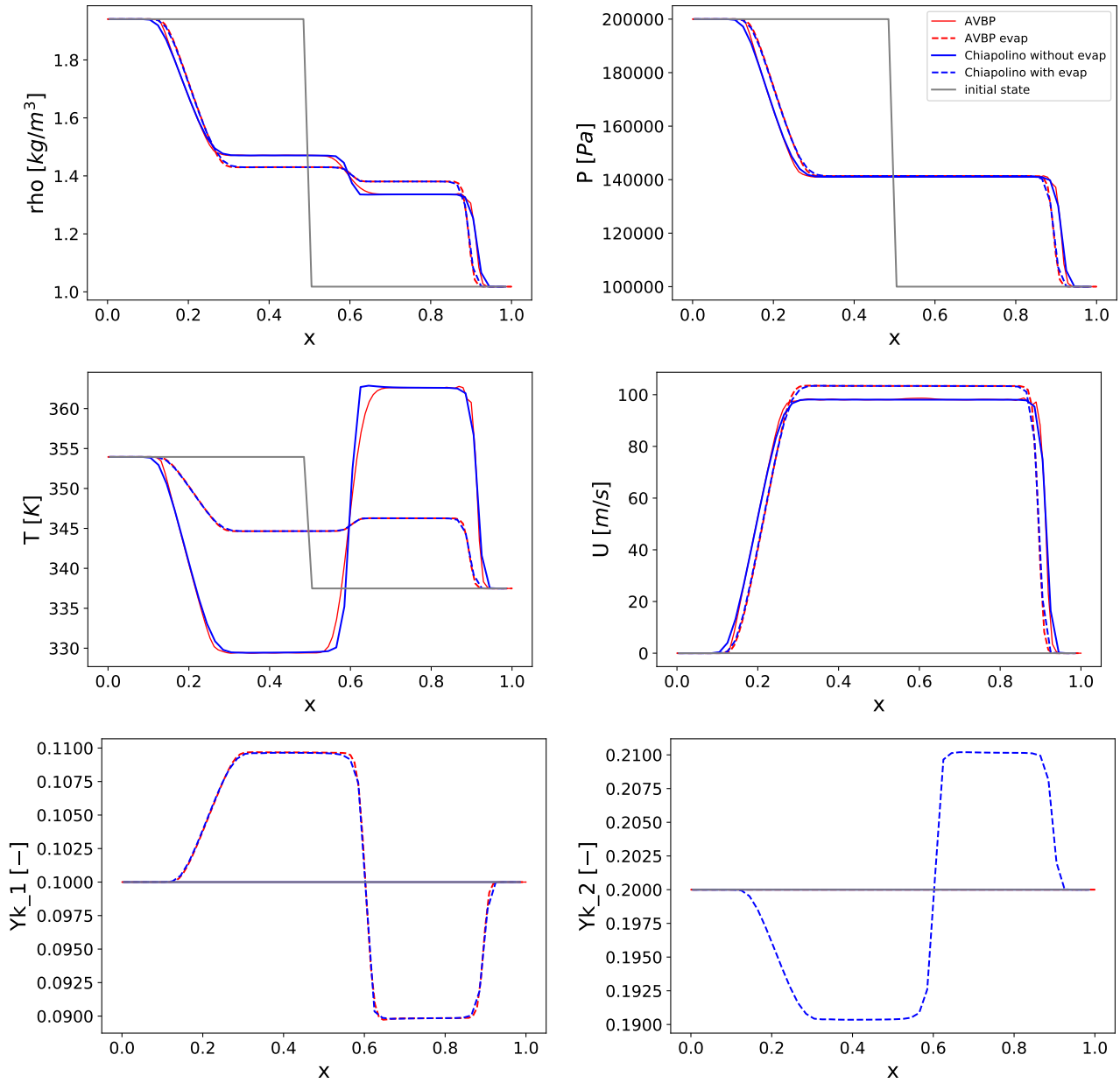


FIGURE B.1 – Comparaison des résultats obtenus avec (ligne pointillée) et sans (ligne pleine) évaporation en utilisant le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'AVBP (rouge) avec ceux de Chiapolino (bleu) pour un cas de tube à choc diphasique avec l'air en proportions majoritaires. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s⁻¹, $T_l \approx 354$ K, $T_r \approx 337$ K, $Y_{1,l} = Y_{1,r} = 0.1$, $Y_{2,l} = Y_{2,r} = 0.2$ et $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 0.7$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1 ms.

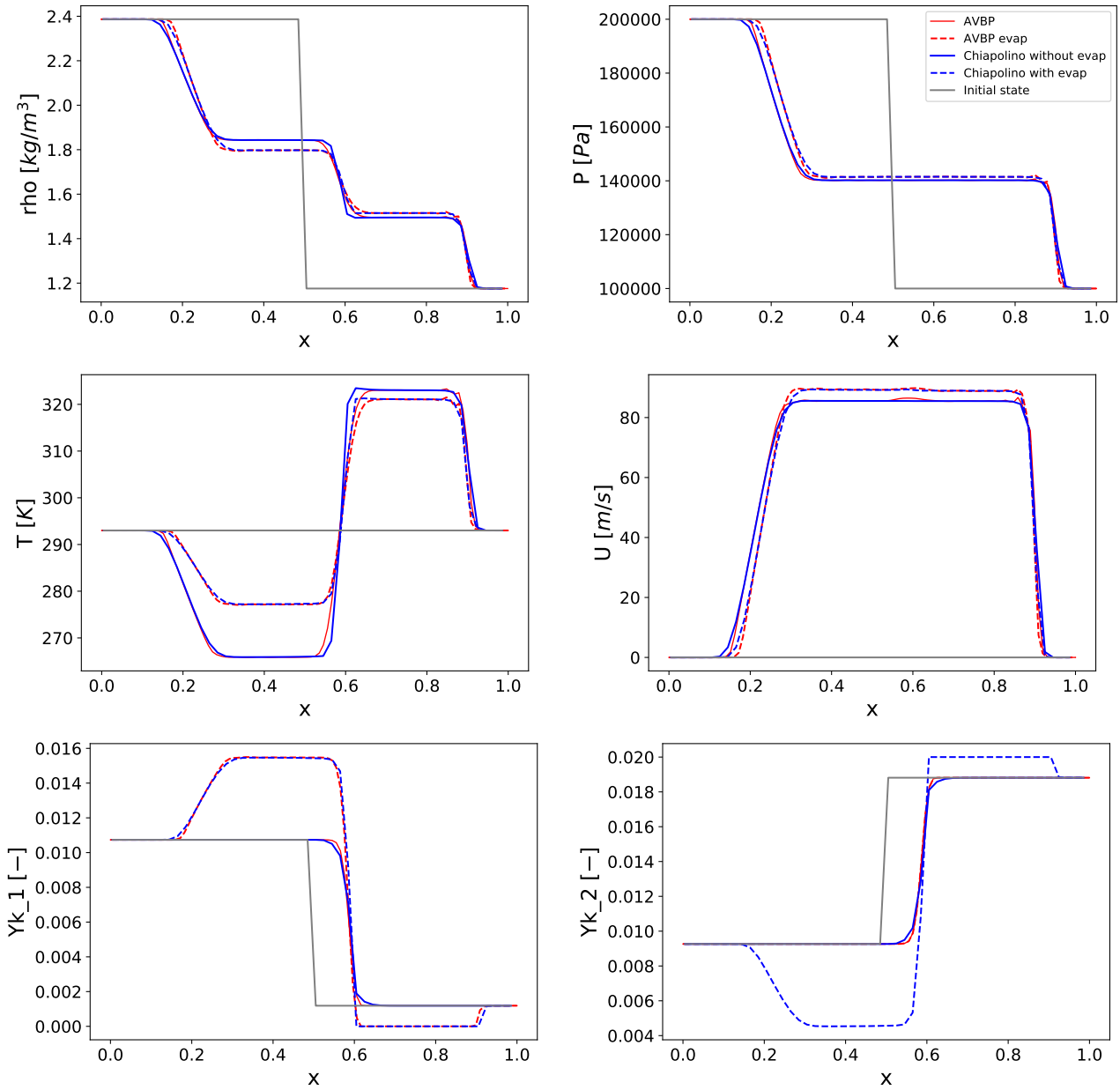


FIGURE B.2 – Comparaison des résultats obtenus avec (ligne pointillée) et sans (ligne pleine) évaporation en utilisant le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'AVBP (rouge) avec ceux de Chiapolino (bleu) pour un cas de tube à choc diphasique avec l'air en proportions majoritaires. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s⁻¹, $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 1.073.10^{-2}$, $Y_{1,r} \approx 1.186.10^{-3}$, $Y_{2,l} \approx 9.263.10^{-3}$, $Y_{2,r} \approx 1.881.10^{-2}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 0.98$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1 ms.

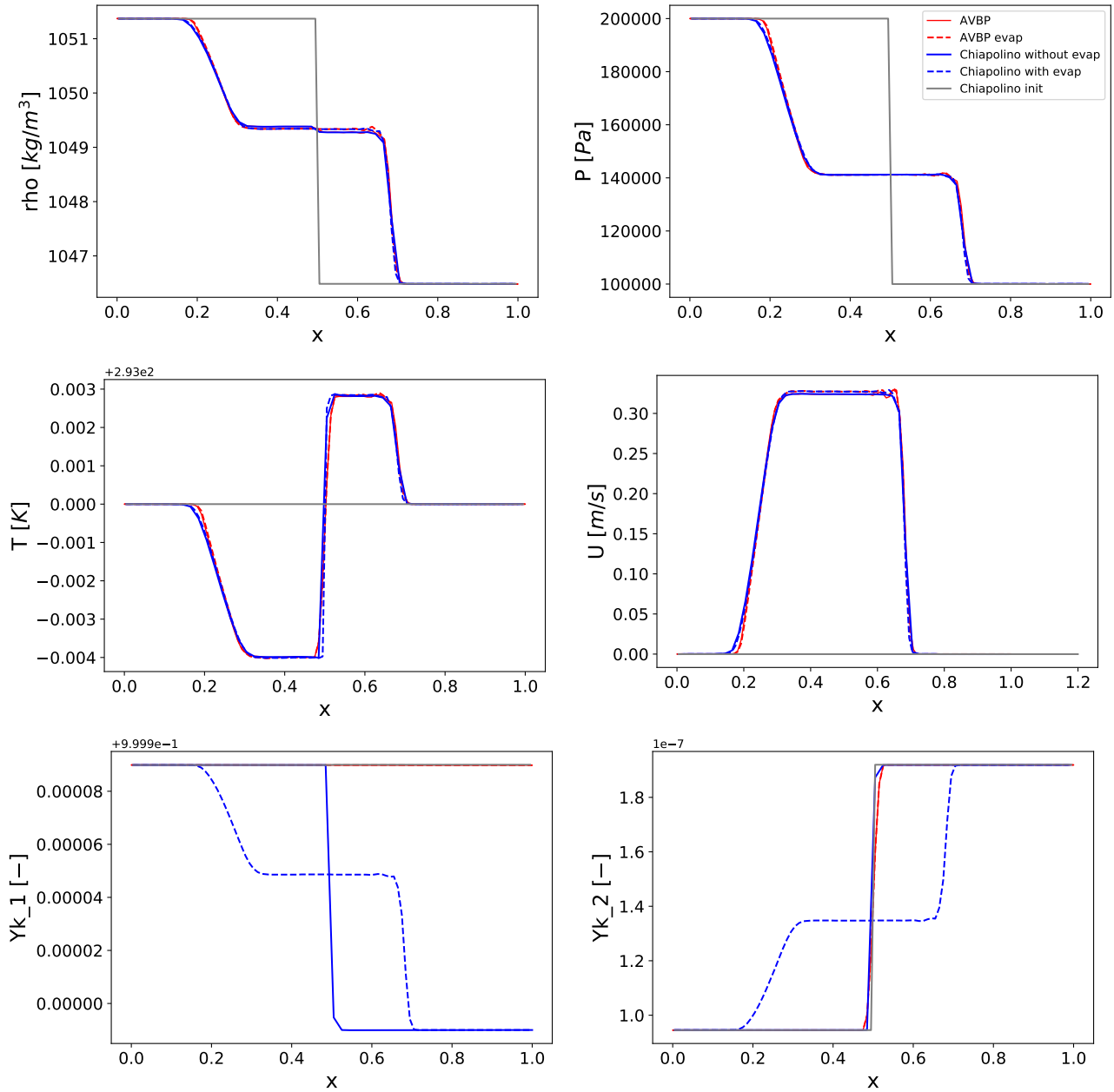


FIGURE B.3 – Comparaison des résultats obtenus avec (ligne pointillée) et sans (ligne pleine) évaporation en utilisant le solveur de Riemann HLLC MUSCL d'AVBP (rouge) avec ceux de Chiapolino (bleu) pour un cas de tube à choc diphasique avec le liquide en proportions majoritaires. La ligne en pointillés représente la condition initiale : $P_l = 2.10^5$ Pa, $P_r = 1.10^5$ Pa, $U_l = U_r = 0$ m.s⁻¹, $T_l = T_r = 293$ K, $Y_{1,l} \approx 0.9999899$, $Y_{1,r} = 0.9999898$, $Y_{2,l} = 9.45.10^{-8}$, $Y_{2,r} = 1.919.10^{-7}$, $Y_{3,l} = Y_{3,r} = 10^{-5}$. Maillage : 100 éléments. Temps final : 1.5 ms.

Annexe C

Solveur de Riemann : Gestion des interfaces entre processeurs

Les interfaces entre les processeurs ont fait l'objet d'un travail important pour permettre un échange performant et à faible coût mémoire des données nécessaires au fonctionnement du solveur numérique.

La Figure C.1 illustre une configuration typique au niveau d'une interface entre deux processeurs. Elle permet d'observer que le volume dual se retrouve coupé en deux. Pour fermer le volume de contrôle, les processeurs $P1$ et $P2$ doivent donc échanger les contributions à la somme des flux des faces qui leur appartiennent. Lorsque le schéma de Godunov est résolu avec un solveur de Riemann à l'ordre 1, cette opération ne pose pas de problème particulier. En effet, chaque processeur calcule directement les contributions des faces qui lui appartiennent en utilisant uniquement les valeurs des variables conservatives aux différents sommets de ses cellules, puis, les sommes des contributions stockées aux noeuds frontières sont simplement échangées et additionnées. Pour chaque noeud frontière i , l'opération peut être résumée par la formule suivante :

$$\left[\sum_{f=1}^{N_f} F_f \cdot \vec{n}_f^D S_f^D \right]_i = \sum_{p=1}^{N_{proc}} \left[\sum_{f=1}^{N_f^p} F_f \cdot \vec{n}_f^D S_f^D \right]_i \quad (C.1)$$

A l'ordre 2, l'utilisation des gradients amont et aval dans la procédure de reconstruction MUSCL nécessite de compléter l'opération par un échange préalable des gradients aux centres des cellules. Le code AVBP étant conçu pour échanger des valeurs entre les noeuds, la stratégie proposée consiste à écrire les gradients dans un tableau localisé aux noeuds, appelé "*exchange_grad*", puis, à échanger des valeurs entre les processeurs par une addition des tableaux de chaque côté de la frontière. La Figure C.2 illustre l'étape de recopie des gradients au niveau du noeud i séparé par deux processeurs. Dans le cas de la Figure C.2, l'étape d'échange

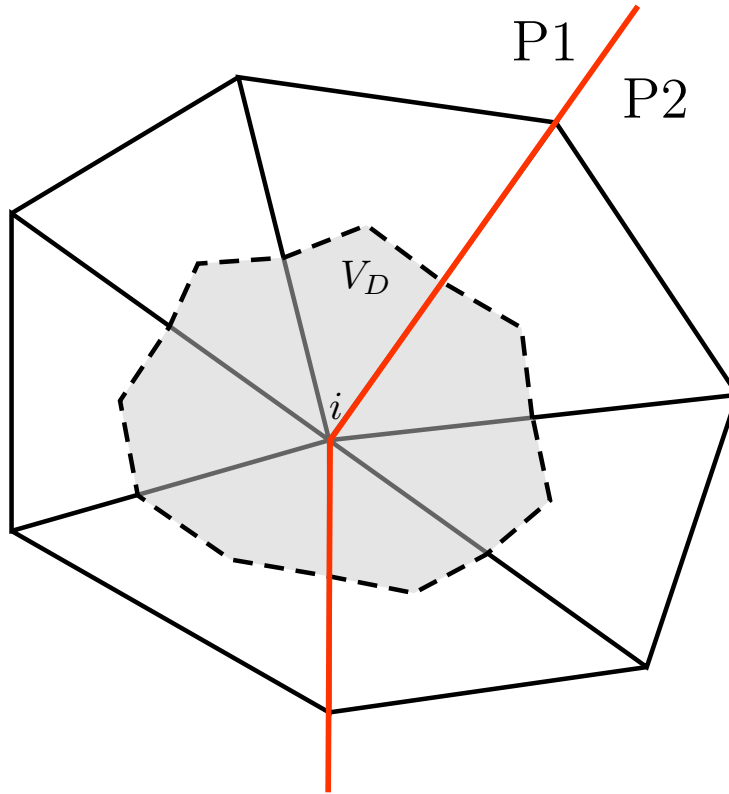


FIGURE C.1 – Volume dual construit sur un maillage triangle et séparé par la frontière entre les processeurs $P1$ et $P2$.

s'écrit :

$$exchange_grad_i = exchange_grad_i^{P1} + exchange_grad_i^{P2} \quad (C.2)$$

$$exchange_grad_i = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \nabla W_{C4} \\ \nabla W_{C5} \\ \nabla W_{C6} \\ \nabla W_{C7} \end{bmatrix}_i^{P1} + \begin{bmatrix} \nabla W_{C1} \\ \nabla W_{C2} \\ \nabla W_{C3} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}_i^{P2} \quad (C.3)$$

$$exchange_grad_i = \begin{bmatrix} \nabla W_{C1} \\ \nabla W_{C2} \\ \nabla W_{C3} \\ \nabla W_{C4} \\ \nabla W_{C5} \\ \nabla W_{C6} \\ \nabla W_{C7} \end{bmatrix}_i \quad (C.4)$$

Ceci peut se généraliser par la formule :

$$exchange_grad_i = \sum_{p=1}^{N_{proc}} exchange_grad_i^p \quad (C.5)$$

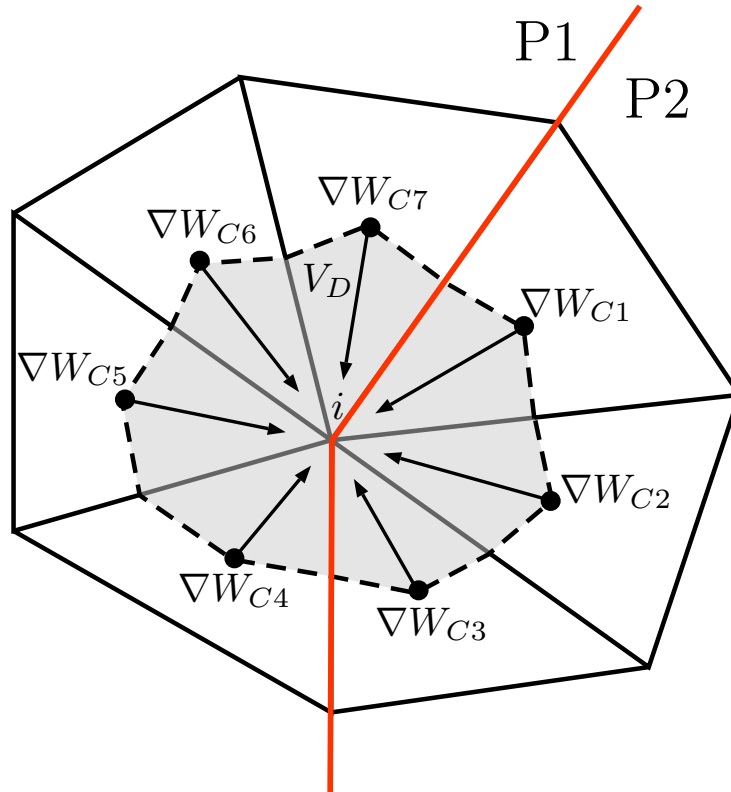


FIGURE C.2 – Illustration de la copie au niveau du noeud i des gradients calculés au centre des cellules C_1 à C_7 .

La définition du tableau *exchange_grad* a fait l'objet d'une attention particulière car sa taille peut rapidement devenir très importante et engendrer des dépassements mémoires. Des travaux d'optimisation, encore perfectibles, ont donc été conduits et ont amené à la taille de tableau suivante :

$$N_{var} \times N_{dim} \times N_{max\ neighbor\ cells} \times N_{neighbor\ proc} \times N_{interf\ nodes}$$

avec,

- N_{var} : nombre de variables à reconstruire (i.e. nombre de variables primitives + nombre d'espèces transportées).
- N_{dim} : nombre de dimension.
- $N_{max\ neighbor\ cells}$: nombre maximum de cellules environnant un noeud dans le domaine de calcul.
- $N_{neighbor\ proc}$: nombre de processeurs voisins au processeur où le tableau est alloué.
- $N_{interf\ nodes}$: nombre de noeuds frontières du processeur où le tableau est alloué.

La définition uniquement sur les noeuds d'interface $N_{interf\ nodes}$, et non sur tous les noeuds du processeur, permet en particulier de réduire la taille du tableau de façon importante. Cependant, elle constitue une spécificité pour le code AVBP ce qui pose actuellement des difficultés de compatibilité avec les routines permettant l'échange des données entre les processeurs. Pour pallier ce problème, l'échange des données contenues dans le tableau *exchange_grad* est sous-cyclé :

1. Une partie du tableau *exchange_grad* est copiée dans le tableau *Snode_exchange_grad*

- qui est plus petit mais défini sur tous les noeuds du processeur.
2. L'échange et l'addition des valeurs contenues dans le tableau *Snode_exchange_grad* provenant des différents processeurs est réalisé.
 3. Le tableau *Snode_exchange_grad* mis à jour est recopié dans le tableau *exchange_grad*.
 4. Les étapes 1, 2 et 3 sont répétées jusqu'à ce que tout le tableau *exchange_grad* ait été mis à jour.

Bien que cette stratégie permette d'éviter les dépassements de mémoire, elle provoque une dégradation des performances d'exécution du code AVBP. Le ralentissement n'est pas significatif dans les cas 2D mais devient problématique dans les cas 3D où la taille du vecteur *exchange_grad* est importante. A terme, les routines permettant l'échange des données entre les processeurs devront être adaptées pour gérer des communications entre des tableaux définis sur $N_{interf\ nodes}$.

Bibliographie

- Abgrall, R. & Saurel, R. (2003), ‘Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures’, *Journal of Computational Physics* **186**(2), 361–396. 184
- Abramzon, B. & Sirignano, W. A. (1989), ‘Droplet vaporization model for spray combustion calculations’, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **32**(9), 1605–1618. 32, 117
- Adam, J. R., Lindblad, N. R. & Hendricks, C. D. (1968), ‘The collision, coalescence, and disruption of water droplets’, *Journal of Applied Physics* **39**, 5173–5180. 245
- Agbaglah, G., Chiodi, R. & Desjardins, O. (2017), ‘Numerical simulation of the initial destabilization of an air-blasted liquid layer’, *Journal of Fluid Mechanics* **812**, 1024–1038. 19, 251, 254, 255
- Aigner, M. & Wittig, S. (1988), ‘Swirl and counterswirl effects in prefilming airblast atomizers’, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* **110**(1), 105–110. 29, 153, 180
- Alauzet, F. & Loseille, A. (2010), ‘High-order sonic boom modeling based on adaptive methods’, *Journal of Computational Physics* **229**, 561–593. 214, 217, 218
- Allaire, G., S., C. & Kokh, S. (2002), ‘A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids’, *Journal of Computational Physics* **181**(2), 577–616. 185, 186
- Allen, S. M. & Cahn, J. W. (1979), ‘A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening’, *Acta metallurgica* **27**(6), 1085–1095. 74, 75
- Amsden, A. A. & Harlow, F. H. (1970), ‘The smac method : a numerical technique for calculating incompressible fluid flows’, *Technical report, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, LA-4370* . 69
- Apte, S. V., Gorokhovski, M. & Moin, P. (2003), ‘Large-eddy simulation of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup’, *ASME Turbo Expo 2003 : Power for Land, Sea, and Air, Atlanta* . 45, 170, 171
- Arai, T. & Hashimoto, H. (1985), ‘Disintegration of a thin liquid sheet in a concurrent gas stream’, *Proceedings of the Third International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, London* . 102
- Ashgriz, N. & Poo, J. Y. (1990), ‘Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops’, *Journal of Fluid Mechanics* **221**, 183–204. 19, 245, 246, 247

- Atkins, P. & De Paula, J. (2006), *Atkins Physical Chemistry, Eighth Edition*, W. H. Freeman and Company, New York. 16, 189, 190
- Auffray, V. (2014), Etude comparative de schémas numériques pour la modélisation de phénomènes diffusifs sur maillages multiéléments., PhD thesis, Institut national polytechnique de Toulouse. 215
- Bacharoudis, E., Bratec, H., Keirsbulck, L., Buchlin, J.-M. & Labraga, L. (2014), ‘Simplified model for the prediction of the occurrence of film atomization in corner geometries’, *International Journal of Multiphase Flow* **58**, 325–337. 11, 103, 104, 105, 108, 109, 110
- Baer, M. & Nunziato, J. (1986), ‘A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials’, *International Journal of Multiphase Flows* **12**(6), 861–889. 76, 183, 184, 185
- Barth, T. J. (1995), ‘Aspects of unstructured grids and finite-volume solvers for the Euler and Navier-Stokes equations’, *VKI Lecture Series* . 214
- Basset, A. B. (1888), *A treatise on hydrodynamics : with numerous examples. Volume 2.*, Deighton Bell and Company. 113
- Beck, J. E., Lefebvre, A. H. & Koblish, T. R. (1991), ‘Airblast atomization at conditions of low air velocity’, *Journal of Propulsion and Power* **7**(2), 207–212. 29, 153, 180
- Ben Rayana, F. (2007), Contribution à l’étude des instabilités interfaciales liquide-gaz en atomisation assistée et tailles de gouttes, PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble. 35, 250, 251, 254
- Ben Rayana, F., Cartellier, A. & Hopfinger, E. (2006), ‘Assisted atomization of a liquid layer : investigation of the parameters affecting the mean drop size prediction’, *10th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 89, 90, 250
- Beneš, M., Chalupecký, V. & Mikula, K. (2004), ‘Geometrical image segmentation by the Allen-Cahn equation’, *Applied Numerical Mathematics* **51**, 187–205. 74
- Bhayaraju, U. C. & Hassa, C. (2009), ‘Planar liquid sheet breakup of prefilming and nonpre-filming atomizers at elevated pressures’, *Atomization and Sprays* **19**(12), 1147–1169. 29, 30, 153, 180
- Bhayaraju, U. & Hassa, C. (2006), ‘Surface wave propagation and breakup in planar liquid sheets of prefilming airblast atomisers’, *10th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 166
- Bird, R. B., Stewart, W. E. & Lighfoot, E. N. (1960), *Transport phenomena*, John Wiley, New York. 49
- Boeck, T. & Zaleski, S. (2005), ‘Viscous versus inviscid instability of two-phase mixing layers with continuous velocity profile’, *Physics of Fluids* **17**, 032106. 35
- Boivin, P., Cannac, M. A. & Le Métayer, O. (2019), ‘A thermodynamic close for the simulation of multiphase reactive flows’, *International Journal of Thermal Sciences* **137**, 640–649. 17, 193, 194, 197, 198, 200, 202, 241, 251

- Boussinesq, J. (1903), *Théorie analytique de la chaleur. Volume 2.*, Ecole Polytechnique. 113
- Brackbill, J. U., Krothe, D. B. & Zemach, C. (1992), ‘A Continuum Method for Modeling Surface Tension’, *Journal of Computational Physics* **100**, 335–354. 237
- Brend, M. A., Barker, A. G. & Carrotte, J. F. (2020), ‘Measurements of fuel thickness for prefilming atomisers at elevated pressure’, *International Journal of Multiphase Flow* **131**, 103313. 29, 30
- Cahn, J. W. (1961), ‘On spinodal decomposition’, *Acta metallurgica* **9**(9), 795–801. 74
- Cahn, J. W. & Hilliard, J. E. (1958), ‘Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy’, *Journal of Chemical Physics* **28**(2), 258–267. 73
- Cahn, J. W. & Hilliard, J. E. (1971), ‘A spinodal decomposition : A reprise’, *Acta metallurgica* **19**(2), 151–161. 74, 75
- Carmona, J., Odier, N., Desjardins, O., B., C., Misdariis, A. & Cayre, A. (2021), ‘A comparative study of Direct Numerical Simulation and experimental results on a prefilming airblast atomization configuration’, *Atomization and Sprays* **31**(8), 9–32. 82
- Carpentier, R. (1998), ‘Comparaison entre des schémas 2D de type Roe sur maillage régulier triangle ou quadrangle : II : calcul au sommet - Le $\beta\gamma$ schéma’, *RR-3360, INRIA* . 217
- Cessou, A., Honoré, D. & Cléon, G. (2010), ‘Safir - simulation avancée des foyers industriels avec recycle. Phase 3, rapport final’, *Technical report, CORIA CNRS UMR 6614, INSA et Université de Rouen* . 9, 62
- Chang, T., Chen, G.-Q. & Yang, S. (1995), ‘On the 2D Riemann problem for the compressible Euler equations - I. Interaction of shocks and rarefaction waves’, *Discrete and continuous dynamical systems* **1**(4), 555–584. 229
- Charru, F. (2007), *Instabilités hydrodynamiques*, Savoirs actuels. 34, 126
- Chassaing, P. (2000), *Turbulence en mécanique des fluides*, Polytech de l’INP. 50
- Chaussonnet, G. (2014), Modeling of liquid film and breakup phenomena in Large-Eddy Simulations of aeroengines fueled by airblast atomizers., PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 8, 9, 14, 15, 31, 41, 125, 129, 137, 140, 158, 161, 162, 163, 180, 262
- Chaussonnet, G., Gepperth, S., Holz, R., Koch, R. & J., B. H. (2020), ‘Influence of the ambient pressure on the liquid accumulation and on the primary spray in prefilming airblast atomization’, *International Journal of Multiphase Flow* **125**, 103229. 29
- Chaussonnet, G., Müller, A., Holz, S., Koch, R. & Bauer, H.-J. (2017), ‘Time-response of recent prefilming airblast atomization models in an oscillating air flow field.’, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* **129**. 122, 125, 128
- Chaussonnet, G., Riber, E., Vermorel, O., Cuenot, B., Gepperth, S. & Koch, R. (2013), ‘Large Eddy Simulation of a prefilming airblast atomizer’, *ILASS Europe, Proceedings of the 25th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 125, 129, 180, 262

- Chaussonnet, G., Vermorel, O., Riber, E. & Cuenot, B. (2016), ‘A new phenomenological model to predict drop size distribution in Large-Eddy Simulations of airblast atomizers’, *International Journal of Multiphase Flow* **80**, 29–42. 1, 12, 14, 44, 125, 126, 127, 128, 129, 134, 147, 148, 159, 160, 162, 180, 262
- Chiapolino, A., Boivin, P. & Saurel, R. (2017), ‘A simple and fast phase transition relaxation solver for compressible multicomponent two-phase flows’, *Computers & Fluids* **150**, 31–45. 7, 10, 20, 21, 77, 78, 187, 194, 223, 224, 259, 260, 267, 268, 269, 270
- Chiodi, R. & Desjardins, O. (2017a), ‘A Numerical Parametric Study on the Air-Blast Atomization of a Planar Liquid Layer’, *55th AIAA Aerospace Sciences Meeting* . 89, 251, 252
- Chiodi, R. & Desjardins, O. (2017b), ‘A reformulation of the conservative level set reinitialization equation for accurate and robust simulation of complex multiphase flows’, *Journal of Computational Physics* **343**, 186–200. 9, 66, 67
- Chiu, P.-H. & Lin, Y.-T. (2011), ‘A conservative phase field method for solving incompressible two-phase flows’, *Journal of Computational Physics* **230**, 185–204. 10, 75, 76
- Choi, H. & Moin, P. (1994), ‘Effects of the computational time step on numerical solutions of turbulent flow’, *Journal of Computational Physics* **113**(1), 1–4. 83
- Choi, Y. H. & Merkle, C. L. (1993), ‘The application of preconditioning in visous flows’, *Journal of Computational Physics* **105**, 207–223. 197
- Chorin, A. J. (1968), ‘Numerical solution of the Navier-Stokes equations’, *Mathematics of computation* **22**, 745–762. 61
- Christian, J. W. (2002), *The theory of transformations in metals and alloys*, Newnes. 74
- Clift, R., Grace, J. R. & Weber, M. E. (1978), *Bubbles, Drops and Particles*, Academic Press. 115
- Colin, O. (2000), Simulation aux Grandes Echelles de la Combustion Turbulente Prémélangée dans les Statoréacteurs, PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 143, 166
- Colin, O. & Rudgyard, M. (2000), ‘Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations’, *Journal of Computational Physics* **162**(2), 338–371. 61, 143, 213
- Collin-Bastiani, F., Marrero-Santiago, J., Riber, E., Cabot, G., Renou, B. & Cuenot, B. (2018), ‘A joint experimental and numerical study of ignition in a spray burner’, *Proceedings of the Combustion Institute* **000**, 1–9. 112
- Cournède, P.-H., Koobus, B. & Dervieux, A. (2006), ‘Positivity statements for a mixed-element-volume scheme on fixed and moving grids’, *European Journal of Computational Mechanics* **15**, 767–798. 214, 217, 218
- Craster, R. V. & Matar, O. K. (2009), ‘Dynamics and stability of thin liquid films’, *Reviews of modern physics* **81**(3), 1131–1198. 33, 34, 236
- Daly, B. J. (1969), ‘Numerical Study of the effect of surface tension on interface instability’, *Physics of Fluids* **12**(7), 1340–1354. 69

- Davis, S. (1988), ‘Simplified second-order Godunov-type methods’, *Shock Waves* **9**(3), 25–34. 208, 209
- De Sousa, F. S., Mangiavacchi, N., Nonato, L. G., Castelo, A., Tomé, M. F., Ferreira, V. G., Cuminato, J. A. & McKee, S. (2004), ‘A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3D multi-fluid flows with free surfaces’, *Journal of Computational Physics* **198**, 469–499. 9, 69, 70
- Dean, R. B. (1978), ‘Reynolds number dependence of skin friction and other bulk flow variables in two-dimension rectangular duct flow’, *Journal of Fluids Engineering* **100**, 215–223. 86
- Debiez, C. (1996), ‘Contribution à l’étude des schémas aux volumes finis décentrés à faible dissipation transverse’, *RR-2985, INRIA* . 214
- Debiez, C. & Dervieux, A. (2000), ‘Mixed-element-volume MUSCL methods with weak viscosity for steady and unsteady flow calculations’, *Computers & Fluids* **29**, 89–118. 214, 217, 218
- Debiez, C., Dervieux, A., Mer, K. & Nkonga, B. (1998), ‘Computation of unsteady flows with mixed finite volume/finite element upwind methods’, *International journal for numerical methods in fluids* **27**, 193–206. 214
- Déjean, B., Berthoumieu, P. & Gajan, P. (2016), ‘Experimental study on the influence of liquid and air boundary conditions on a planar air-blasted liquid sheet’, *International Journal of Multiphase Flow* **79**, 214–224. 29, 30
- Deng, X. & Boivin, P. (2020), ‘Diffuse interface modelling of reactive multiphase flows applied to sub-critical cryogenic jet’, *Applied Mathematical Modelling* **84**, 405–424. 16, 187, 234, 235
- Deng, X., Boivin, P. & Xiao, F. (2019), ‘A new formulation for two-wave Riemann solver accurate at contact interfaces’, *Physics of Fluids* **31**, 046102. 18, 229, 230
- Desjardins, O., Blanquart, G., Balarac, G. & Pitsch, H. (2008), ‘High order conservative finite difference scheme for variable density low Mach number turbulent flow’, *Journal of Computational Physics* **227**(15), 7125–7159. 81, 83
- Desjardins, O., McCaslin, J. O., Owkes, M. & Brady, P. (2013), ‘Direct numerical and large-eddy simulation of primary atomization in complex geometries’, *Atomization and Sprays* **23**(11), 1001–1048. 83, 251
- Desjardins, O., Moureau, V. & Pitsch, H. (2008), ‘An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization’, *Journal of Computational Physics* **227**(18), 8395–8416. 66
- Dimotakis, P. E. (1986), ‘Two-dimensional shear-layer entrainment’, *AIAA Journal* **24**(11), 1791–1796. 89, 251
- Dombrowski, N. & Johns, W. R. (1963), ‘The aerodynamic instability and disintegration of viscous liquid sheets’, *Chemical Engineering Science* **18**, 203–214. 121
- Drew, D. A. & Segel, L. A. (1971), ‘Averaged equations for two-phase flows’, *Studies in Applied Mathematics* **50**(3), 205–231. 76

- Dumbser, M., Zanotti, O., Loubère, R. & Diot, S. (2014), ‘A posteriori subcell limiting of the discontinuous galerkin finite element method for hyperbolic conservation laws’, *Journal of Computational Physics* **278**, 47–75. 229, 230
- Dyadechko, V. & Shashkov, M. (2005), ‘Moment-of-fluid interface reconstruction.’, *Technical report, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, LA-UR-05-7571* . 64
- Eckel, G., Grohmann, J., Cantu, L., Slavinskaya, N., Kathrotia, T., Rachner, M., Le Clercq, P., Meier, W. & Aigner, M. (2019), ‘LES of a swirl-stabilized kerosene spray flame with a multi-component vaporization model and detailed chemistry’, *Combustion and Flame* **207**, 134–152. 112
- Eckel, G., Rachner, M., Le Clercq, P. & Aigner, M. (2013), ‘Semi-empirical primary atomization models for transient Lagrangian spray simulation’, *8th International Conference on Multiphase Flow* . 12, 122, 123, 124, 125
- El-Shanawany, M. & Lefebvre, A. H. (1980), ‘Airblast atomization : the effect of linear scale on mean drop size’, *Energy* **4**(4), 184–189. 29
- Elghobashi, S. & Truesdell, G. C. (1992), ‘Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence.’, *Journal of Fluid Mechanics* **242**, 655–700. 114
- Elliott, C. M. (1989), ‘The Cahn-Hilliard model for the kinetics of phase separation’, *Mathematical models for phase change problems* **88**, 35–73. 73
- Estrade, J.-P., Garentz, H., Lavergne, G. & Biscos, Y. (1999), ‘Experimental investigation of dynamic binary collision of ethanol droplets - a model for droplet coalescence and bouncing’, *International Journal of Heat and Fluid Flow* **20**, 486–491. 245
- Felden, A. (2017), Development of Analytically Reduced Chemistries (ARC) and applications in Large Eddy Simulations (LES) of turbulent combustion, PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 8, 28, 48
- Fernandez, V. G., Berthoumie, P. & G., L. (2009), ‘Liquid sheet disintegration at high pressure : An experimental approach’, *Comptes Rendus Mecanique* **337**, 481–491. 9, 40, 41, 42, 85
- Friedrich, M. A., Lan, H., Wegener, J. L., Drallmeier, J. A. & Armaly, B. F. (2008), ‘A separation criterion with experimental validation for shear-driven films in separated flows’, *Journal of Fluids Engineering* **051301**. 11, 102, 103, 258
- Fuster, D., Bagué, A., Boeck, T., L., L. M., A., L., Popinet, S., Ray, R. & Scardovelli R., Zaleski, S. (2009), ‘Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method’, *International Journal of Multiphase Flow* **35**, 550–565. 251
- Fuster, D., Matas, J., Marty, S., Popinet, S., Hoepffner, J., Cartellier, A. H. & Zaleski, S. (2013), ‘Instability regimes in the primary breakup region of planar coflowing sheets’, *Journal of Fluid Mechanics* **736**, 150–176. 19, 89, 250, 251
- Fyfe, D. E., Oran, E. S. & Fritts, M. F. (1988), ‘Surface tension and viscosity with Lagrangian hydrodynamics on triangular mesh.’, *Journal of Computational Physics* **30**, 349–384. 241

- García, M. (2009), Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur parallèle et non-structuré pour la simulation aux grandes échelles., PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 113, 114, 117, 131
- Gepperth, S., Guildenbecher, D., Koch, R. & Bauer, H.-J. (2010), ‘Pre-filming primary atomization : Experiments and modeling’, *23th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 9, 42, 43, 44, 83, 95
- Gepperth, S., Koch, R. & Bauer, H.-J. (2013), ‘Pre-filming primary atomization : Experiments and modeling’, *ASME Turbo Expo 2013 : Turbine Technical Conference and Exposition, American Society of Mechanical Engineers* . 9, 29, 42, 43, 44, 125
- Gepperth, S., Müller, A., Koch, R. & Bauer, H.-J. (2012), ‘Ligament and Droplet Characteristics in Prefilming Airblast Atomization’, *12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 5, 6, 7, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 30, 42, 43, 44, 81, 82, 83, 84, 97, 100, 105, 107, 110, 122, 124, 125, 128, 130, 133, 134, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 147, 148, 149, 151, 158, 159, 161, 162, 163, 172, 180, 261, 262, 264, 265, 266
- Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. & Cabot, W. (1991), ‘A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model’, *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* **3**(7), 1760–1765. 58, 143
- Gibbs, J. W. (1878), ‘On the equilibrium of heterogeneous substances’, *Transactions of the connecticut academy of arts and sciences* **3**, 343–524. 71, 73
- Glimm, J., Isaacson, E., Marchesin, D. & McBryan, O. (1981), ‘Front tracking for hyperbolic systems’, *Advances in applied mathematics* **2**, 91–119. 69
- Godunov, S. K. (1959), ‘Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics’, *Matematicheskij sbornik - Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences* **47**(3), 271–306. 61, 77, 79, 182, 205, 213, 214, 223, 233
- Gorokhovski, M. (2001), ‘The stochastic Lagrangian model of drop breakup in the computation of liquid sprays’, *Atomization and Sprays* **11**, 505–519. 169, 170
- Gorokhovski, M. & Saveliev, V. L. (2003), ‘Analyses of Kolmogorov’s model of breakup and its application into Lagrangian computation of liquid sprays under air-blast atomization’, *Physics of Fluids* **15**, 184. 170, 171
- Gosselin, V., Ferret, B. & Bazile, R. (2017), ‘Coupled study of the film and spray on a basic annular prefilming airblast atomizer’, *28th Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 8, 35, 36, 39, 41, 85, 90
- Gubaidullin, A. (2007), ‘Comments on Liquid Film Atomization on Wall Edges-Separation Criterion and Droplets Formation Models’, *Journal of Fluids Engineering* **129**, 665–666. 102
- Guedot, L. (2015), développement de méthodes numériques pour la caractérisation des grandes structures tourbillonnaires dans les brûleurs aéronautiques : applications aux systèmes d’injection multi-points des instabilités interfaciales liquide-gaz en atomisation assistée et tailles de gouttes, PhD thesis, INSA de Rouen. 8, 27

- Gueyffier, D., Li, J., Nadim, A., Scardovelli, R. & Zaleski, S. (1999), ‘Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows’, *Journal of Computational Physics* **152**, 423–456. 239
- Guildenbecher, D., López-Rivera & Sojka, P. (2009), ‘Secondary atomization’, *Experiments in Fluids* **46**(3), 371–402. 95
- Guillard, H. & Viozat, C. (1999), ‘On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit.’, *Computers & Fluids* **28**, 63–86. 197
- Harlow, F. H. & Welch, J. E. (1965), ‘Numerical calculation of time dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface’, *Physics of Fluids* **8**, 2182. 68
- Harten, A., Lax, P. D. & Van Leer, B. (1983), ‘On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws’, *Journal of Computational Physics* **25**(1), 35–61. 207
- Haselbacher, A., Najjar, F. M. & Ferry, J. P. (2007), ‘An efficient and robust particle-localization algorithm for unstructured grids’, *Journal of Computational Physics* **225**, 2198–2213. 131
- Hashmi, A. A. & Klingsporn, M. (2011), ‘On the experimental investigation on primary atomization of liquid streams’, *Proceedings of the ASME 2011 Turbo Expo : Turbine Technical Conference and Exposition, GT2011-45545* . 8, 37, 38
- Hejazialhosseini, B., Rossinelli, D. & Koumoutsakos, P. (2013), ‘Vortex dynamics in 3D shock-bubble interaction’, *Physics of Fluids* **25**, 110816. 10, 77, 78
- Hinch, E. J. (1984), ‘A note on the mechanism of the instability at the interface between two shearing fluids’, *Journal of Fluid Mechanics* **144**, 463–465. 35
- Hirschfelder, J., Curtiss, C. & Bird, R. (1954), *Molecular theory of gases and liquids*, Materials Sciences. 48, 49, 234
- Hirt, C. W. & Nichols, B. D. (1981), ‘Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries’, *Journal of Computational Physics* **39**, 201–225. 63
- Hohenberg, P. C. & Halperin, B. I. (1977), ‘Theory of dynamic critical phenomena’, *Reviews of Modern Physics* **49**(3), 435–479. 74
- Holz, S., Chaussonnet, G., Gepperth, S., Koch, R. & Baeur, H.-J. (2016), ‘Comparison of the primary atomisation model PAMELA with drop size distributions of an industrial prefilming airblast nozzle’, *ILASS Europe, Proceedings of the 27th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 128
- Hong, M., Cartellier, A. & Hopfinger, E. (2002), ‘Atomisation and mixing in coaxial injection’, *4th International Conference on Launcher Technology - Space Launcher Liquid Propulsion* . 126
- Hooper, A. P. & Boyd, W. G. C. (1983), ‘Shear-flow instability at the interface between two viscous fluids’, *Journal of Fluid Mechanics* **128**, 507–528. 35

- Hovmöller, E. (1949), ‘The trough-and-ridge diagram.’, *Tellus* **1**(2), 62–66. 93, 108
- Ihme, M., Ma, P. C. & Bravo, L. (2019), ‘Large eddy simulations of diesel-fuel injection and auto-ignition at transcritical conditions.’, *International Journal of Engine Research* **20**(1), 58–68. 191
- Inamura, T., Shiota, M., Tsushima, M. & Kato, M. (2012), ‘Spray Characteristics of Prefilming Type of Airblast Atomizer’, *12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 12, 120, 121, 122
- Jaegle, F., Cabrit, O., Mendez, S. & Poinso, T. (2010), ‘Implementation methods of wall functions in cell-vertex numerical solvers’, *Flow Turbulence Combust* **85**, 245–272. 129
- Jain, S. S., Mani, A. & Moin, P. (2020), ‘A conservative diffuse-interface method for compressible two-phase flows’, *Journal of Computational Physics* **418**, 109606. 77, 258
- Jamet, D. (1998), Etude des potentialités de la théorie du second gradient pour la simulation numérique directe des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase, PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 74
- Jamet, D., Lebaigue, O., Coutris, N. & Delhay, J. M. (2001), ‘The second gradient method for the Direct Numerical Simulation of liquid-vapor flows with phase change’, *Journal of Computational Physics* **169**, 624–651. 74
- Janodet, R., Guillamó, C., Moureau, V., Mercier, R., Lartigue, G., Benard, P., Ménard, T. & Berlemont, A. (2020), ‘A massively parallel accurate conservative level-set algorithm for simulating turbulent atomization on adaptive unstructured grids’, *hal-03024186* . 9, 68
- Janodet, R., Vaudor, G., Lartigue, G., B. P. & Moureau, V. (2019), ‘An unstructured conservative level-set algorithm coupled with dynamic mesh adaptation for the computation of liquid of liquid-gas flows’, *ILASS Europe, Proceedings of the 29th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 68
- Jasuja, A. K. (1981), ‘Airblast atomization of alternative liquid petroleum fuels under high pressure conditions’, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* **103**(3), 514–518. 29, 153, 156, 180
- Jeong, D. & Kim, J. (2017), ‘Conservative Allen-Cahn-Navier-Stokes system for incompressible two-phase fluid flows’, *Computers & Fluids* **156**, 239–246. 74
- Jiang, Y. J., Umemura, A. & Law, C. K. (1992), ‘An experimental investigation on the collision behaviour of hydrocarbon droplets’, *Journal of Fluid Mechanics* **234**, 171–190. 19, 245, 247
- Joncquière, V. (2019), Modélisation et simulation numérique des moteurs à effet Hall, PhD thesis, Institut national polytechnique de Toulouse. 214, 231
- Kapila, A., R., Menikoff, J., Bdzil, J. B., Son, S. F. & Stewart, D. S. (2001), ‘Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : reduced equations’, *Physics of Fluids* **13**(10), 3002–3024. 77, 184, 185, 186

- Karma, A. & Kessler, D. A., L. H. (2001), ‘Phase-Field model of mode III dynamic fracture’, *Physical Review Letters* **87**, 045501. 74
- Kelvin, L. (1871), ‘Hydrokinetic solutions and observations’, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **42**, 362–377. 34, 35
- Keshtiban, I. J., Belblidia, F. & Webster, M. F. (2004), ‘Compressible flow solvers for low mach number flows - a review.’, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **23**, 77–103. 197
- Kim, J. & Moin, P. (1985), ‘Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations’, *Journal of Computational Physics* **59**, 308–323. 61
- Kitano, T., Kaneko, K., Kurose, R. & Komori, S. (2016), ‘Large-eddy simulations of gas- and liquid-fueled combustion instabilities in back-step flows’, *Combustion and Flame* **170**, 63–78. 112
- Kolmogorov, A. (1941), ‘On the log-normal distribution of particles sizes during breakup process’, *Doklady Akademii Nauk SSSR* **31**, 99–101. 51, 57, 170
- Koren, B. (1993), ‘A robust upwind discretization method for advection, diffusion and source terms’, In *Numerical Methods for Advection-Diffusion Problems*, C. B. Vreugdenhil and B. Koren (Eds.). Vieweg, Braunschweig pp. 117–138. 212, 217
- Krzczkowski, S. A. (1980), ‘Measurement of liquid droplet disintegration mechanisms’, *International Journal of Multiphase Flow* **6**, 227–239. 44
- Kurganov, A. & Tadmor, E. (2002), ‘Solution of Two-dimensional Riemann Problems for Gas Dynamics without Riemann Problem Solvers’, *Numerical Methods for Partial Differential Equations* **18**(5), 584–608. 229
- Lafaurie, B., Nardone, C., Scardovelli, R., Zaleski, S. & Zanetti, G. (1994), ‘Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer’, *Journal of Computational Physics* **113**, 113–134. 63
- Lamarque, N. (2007), Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d’hélicoptère, PhD thesis, Institut national polytechnique de Toulouse. 61, 143, 166, 220, 221, 231, 240
- Larricq-Fourcade, C. (2006), Etude de la pulvérisation assistée en air d’une nappe liquide et influence d’un vent ionique sur les instabilités hydrodynamiques, PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l’aéronautique et de l’espace. 9, 39
- Lax, P. D. & Liu, X.-D. (1998), ‘Solution of Two Dimensional Riemann problem of gas dynamics by positive schemes’, *SIAM Journal on Scientific Computing* **19**(2), 319–340. 229
- Lax, P. D. & Wendroff, B. (1960), ‘Systems of conservation laws’, *Communications on Pure Applied Mathematics* **13**(2), 217–237. 61, 143, 166, 213, 231, 233
- Le Chenadec, V. & Pitsch, H. (2013), ‘A monotonicity preserving conservative sharp interface flow solver for high density ratio two-phase flows’, *Journal of Computational Physics* **249**, 185–203. 9, 65

- Le Martelot, S. (2013), Contribution à la simulation numérique directe de l'ébullition, PhD thesis, Université Aix-Marseille. 197, 238
- Le Martelot, S., Saurel, R. & Nkonga, B. (2014), 'Towards the direct numerical simulation of nucleate boiling flows', *International Journal of Multiphase Flow* **66**, 62–78. 10, 77, 238
- Le Métayer, O., Massoni, J. & Saurel, R. (2004), 'Élaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques', *International Journal of Thermal Sciences* **43**(3), 265–276. 191, 192, 193, 200
- Le Métayer, O. & Saurel, R. (2016), 'The Noble-Abel Stiffened-Gas equation of state', *Physics of Fluids* **28**(4), 046102. 193
- Lefebvre, A. H. (1980), 'Airblast atomization', *Progress in Energy and Combustion Science* **6**(1), 233–261. 8, 28, 29, 153, 156, 180
- Lefebvre, A. H. & Miller, D. (1966), Technical report aero, 193, Technical report, The College of Aeronautics Cranfield. 28
- Leslie, D. C. (1979), 'The application of turbulence theory to the formulation of subgrid modelling procedures', *Journal of Fluid Mechanics* **91**(1), 65–91. 58
- Lilly, D. K. (1992), 'A proposed modification of the Germano subgridscale closure method', *Physics of Fluids A* **4**, 633. 58
- Ling, Y., Fuster, D., Tryggvason, G. & Zaleski, S. (2019), 'A two-phase mixing layer between parallel gas and liquid streams : Multiphase turbulence statistics and influence of interfacial instability', *Journal of Fluid Mechanics* **859**, 268–307. 81, 89
- Lo Schiavo, E., Laera, D., Riber, E., Gicquel, L. & Poinso, T. (2020), 'Effect of liquid fuel/wall interaction on thermoacoustic instabilities in swirling spray flames', *Combustion and Flame* **219**, 86–101. 112
- Lord Rayleigh, F. R. S. (1878), 'On the instability of jets', *Proceedings of the London Mathematical Society* **10**(4). 37, 95, 107
- Lozano, A., Barreras, F., Siegler, C. & Löw, D. (2005), 'The effects of sheet thickness on the oscillation of an air-blasted liquid sheet', *Experiments in Fluids* **39**, 127–139. 40, 85
- Mangiavacchi, N., Castelo, A., Tomé, M. F., Cuminato, J. A., De Oliveira, M. L. B. & McKee, S. (2005), 'An effective implementation of surface tension using the marker and cell method for axisymmetric and planar flows', *SIAM Journal on Scientific Computing* **26**(4), 1340–1368. 69
- Mansour, A. & Chigier, N. (1990), 'Disintegration of liquid sheets', *Physics of Fluids* **2**, 706. 39
- Marmottant, P. & Villermaux, E. (2004), 'Fragmentation of stretched liquid ligaments', *Physics of Fluids* **16**(8), 2732–2741. 37, 121, 122, 250

- Maroteaux, F., Llory, D., Le Coz, J.-F. & Habchi, C. (2002), ‘Liquid film atomization on wall edges - Separation criterion and droplets formation model’, *Journal of Fluids Engineering* **124**, 565–575. 101
- Massol, A. (2004), Simulations numériques d’écoulements à travers des réseaux fixes de sphères monodisperses et bidisperses, pour des nombres de Reynolds modérés, PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 11, 116
- Matas, J.-P., Marty, S. & Cartellier, A. H. (2011), ‘Experimental and analytical study of the shear instability of a gas-liquid mixing layer’, *Physics of Fluids* **23**. 35, 250, 254
- Mathew, J., Lechner, R., Foyi, H., Sesterhenn, J. & Friedrich, R. (2003), ‘An explicit filtering method for large eddy simulation of compressible flows’, *Physics of Fluids* **15**(8), 2279–2289. 221
- Maxey, M. R. & Riley, J. J. (1983), ‘Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow.’, *Physics of Fluids* **26**(4), 883–889. 113
- McKee, S., Tomé, M. F., Ferreira, V. G., Cuminato, A., Castelo, A., De Sousa, F. S. & Mangiacavacchi, N. (2008), ‘The MAC method’, *Computers & Fluids* **37**, 907–930. 69
- Mishev, I. (2001), ‘Finite volume methods on Voronoi meshes’, *Methods for Partial Differential equations* . 214
- Modica, L. (1987), ‘The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterion’, *Archive for rational mechanics and analysis* **98**(2), 123–142. 73
- Morris, S. C. & Foss, J. F. (2003), ‘Turbulent boundary layer to single-stream shear layer : the transition region’, *Journal of Fluid Mechanics* **494**, 187–221. 128, 129
- Mosso, S., Swartz, B., Kothe, D. & Clancy, S. (1996), ‘Recent enhancements of volume tracking algorithms for irregular grids’, *Technical report, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, LA-cp-96-227* . 64
- Mukundan, A. A., Ménard, T., Berlemont, A. & Brändle de Motta, J. C. (2019), ‘A comparative study of DNS of airblast atomization using CLSMOF and CLSVOF methods’, *29th Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 81, 85
- Mulder, W. & Osher, S. (1992), ‘Computing interface motion in compressible gas dynamics’, *Journal of Computational Physics* **100**, 209–228. 64
- Mulholland, J. A., Srivastava, R. K. & Wendt, J. O. L. (1988), ‘Influence of droplet spacing on drag coefficient in nonevaporating monodisperse streams.’, *AIAA Journal* **26**(10), 1231–1237. 115, 116
- Müller, A., Koch, R., Bauer, H.-J., Hehle, M. & Schäfer, O. (2006), ‘Performance of Prefilming Airblast Atomizers in Unsteady Flow Conditions’, *ASME Turbo Expo 2006 : Power for Land, Sea and Air, GT2006-90432* . 83
- Müller, A., Schäfer, O. & Wittig, S. (2004), ‘The influence of unsteady flow conditions on liquid sheet atomisation’, *In Atomization and Spray Processes* . 9, 42, 43, 44, 125, 134

- Murrone, A. & Guillard, H. (2005), ‘A five equation reduced model for compressible two phase flow problems’, *Journal of Computational Physics* **202**(2), 664–698. 184, 185, 186
- Murrone, A. & Guillard, H. (2008), ‘Behavior of upwind scheme in the low Mach number limit : III. Preconditioned dissipation for a five equation two phase model.’, *Computers & Fluids* **37**, 1209–1224. 197
- Naygizente, D. (2021), Unsteady simulations of liquid/gas interfaces in real gas flows using the second gradient theory, PhD thesis, Centrale Supélec. 10, 73, 74, 75, 76
- Naygizente, D., Schmitt, T. & Ducruix, S. (2018), ‘Unsteady simulations of liquid/gas interfaces using the second gradient theory’, *14th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 10, 74, 76
- Nicoud, F., Baya Toda, H., Bose, S. & J., L. (2011), ‘Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations’, *Physics of Fluids* **23**, 085106. 59, 166
- Nicoud, F. & Ducros, F. (1999), ‘Subgrid-scale modelling based on the square of the velocity’, *Flow, Turbulence and Combustion* **62**, 183–200. 59
- Noh, W. F. & Woodward, P. (1976), ‘SLIC (Simple Line Interface Calculation)’, *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics* pp. 330–340. 63
- O’ Rourke, P. J. & Amsden, A. A. (1987), ‘The TAB method for numerical calculation of spray droplet breakup’, *SAE Technical Paper* **872089**. 45, 122, 169, 171
- O’ Rourke, P. J. & Amsden, A. A. (1996), ‘A particle numerical model for wall film dynamics in port-Injected engines’, *SAE Technical Paper* **961961**. 101, 118
- O’ Rourke, P. J. & Amsden, A. A. (2000), ‘A spray/wall interaction submodel for the KIVA-3 wall film model’, *SAE Technical Paper* **01-0271**. 118, 167, 169
- Odier, N., Balarac, G., Corre, C. & Moureau, V. (2015), ‘Numerical study of a flapping liquid sheet sheared by a high-speed stream’, *International Journal of Multiphase Flow* **77**, 196–208. 81
- Oishi, C., Ferreira, V., Cuminato, J., Castelo, A., Tomé, M. F. & Mangiavacchi, N. (2004), ‘Implementing implicit schemes in gensmac’, *Trends in applied and computational mathematics* **5**(2), 259–268. 69
- Olsson, E. & Kreiss, G. (2005), ‘A conservative level set method for two phase flow’, *Journal of Computational Physics* **210**, 225–246. 65
- Olsson, E. & Kreiss, G. (2007), ‘A conservative level set method for two phase flow II’, *Journal of Computational Physics* **225**, 785–807. 65, 66
- Osen, C. W. (1927), *Hydrodynamik. Volume 1.*, Akad. Verl.-Ges. 113, 115
- Osher, S. & Sethian, J. A. (1988), ‘Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on Hamilton–Jacobi formulations’, *Journal of Computational Physics* **79**(1), 12–49. 64

- Owen, I. & Ryley, D. J. (1985), ‘The flow of thin liquid films around corners’, *International Journal of Multiphase Flow* **11**(1), 51–62. 101
- Owkes, M. & Desjardins, O. (2014), ‘A computational framework for conservative, three-dimensional, un-split, geometric transport with application to the volume-of-fluid (VOF) method’, *Journal of Computational Physics* **270**, 587–612. 83
- Owkes, M. & Desjardins, O. (2015), ‘A mesh-decoupled height function method for computing interface curvature’, *Journal of Computational Physics* **281**, 285–300. 83
- Park, J. & Huh, K. Y. (2004), ‘Experimental investigation on cellular breakup of a planar liquid sheet from an air-blast nozzle’, *Physics of Fluids* **16**, 625. 40
- Parker, B. & Youngs, D. (1992), ‘Two and three dimensional Eulerian simulation of fluid flow with material interfaces’, *Atomic Weapons Establishment* . 63
- Patel, J. K. & Natarajan, G. (2015), ‘A generic framework for design of interface capturing schemes for multi-fluid flows’, *Computers & Fluids* **106**, 108–118. 63
- Peng, C., Jurman, L. & McCreedy, M. (1991), ‘Formation of solitary waves on gas-sheared liquid layers’, *International Journal of Multiphase Flows* **17**(6), 767–782. 8, 36, 37
- Peng, D.-Y. & Robinson, D. B. (1976), ‘A new two-constant equation of state.’, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* **15**(1), 59–64. 190
- Perigaud, G. & Saurel, R. (2005), ‘A compressible flow model with capillary effects.’, *Journal of Computational Physics* **209**, 139–178. 237, 238, 239, 243, 244
- Pilch, M. & Erdman, C. A. (1987), ‘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**(6), 741–757. 9, 44, 45, 46, 170
- Pilliod, J. E. & Puckett, E. G. (2004), ‘Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces’, *Journal of Computational Physics* **199**(2), 465–502. 63, 64, 83
- Poinsot, T. & Lele, S. (1992), ‘Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows’, *Journal of Computational Physics* **101**(1), 104–129. 139, 166, 220
- Poinsot, T. & Veynante, D. (2005), *Theoretical and numerical combustion*, RT Edwards, Inc. 9, 50, 55, 235
- Poling, B., Prausnitz, J. M. & O’Connell, J. P. (2001), *The properties of Gases and Liquids, Fifth Edition*, McGraw-Hill. 190
- Pope, S. B. (2000), *Turbulence flows*, Cambridge University Press. 53, 86, 89
- Prasad, R. R. & Sreenivasan, K. R. (1989), ‘Scalar interfaces in digital images of turbulent flows’, *Experiments in Fluids* **7**, 259–264. 97
- Pringuey, T. & Steward Cant, R. (2014), ‘Robust conservative level set method for 3D mixed-element meshes - Application to LES of primary Liquid-Sheet Breakup’, *Communications in Computational Physics* **16**(2), 403–439. 80

- Raju, M. S. (2006), ‘Numerical investigation of various atomization models in the modeling of a spray flame’, *44th AIAA aerospace sciences meeting and exhibit* p. 176. 169
- Ramshaw, J. D., O’ Rourke, P. J. & Stein, L. R. (1985), ‘Pressure gradient scaling method for fluid flow with nearly uniform pressure.’, *Journal of Computational Physics* **58**, 361–376. 197
- Raynal, L. (1997), Instabilité et entraînement à l’interface d’une couche de mélange liquide-gaz, PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble. 19, 35, 89, 249, 250, 251, 252, 254, 255
- Reitz, R. D. (1987), ‘Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays’, *Atomisation and Spray Technology* **3**, 309–337. 45, 169
- Reveillon, J. & Vervisch, L. (2005), ‘Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes’, *Journal of Fluid Mechanics* **537**, 317–347. 32
- Reynolds, O. (1883), ‘An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels’, *Proceedings of the Royal Society of London* **35**, 224–226. 50
- Riber, E. (2007), Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents, PhD thesis, Institut national polytechnique de Toulouse. 63
- Richardson, L. F. (1920), ‘The supply of energy from and to atmospheric eddies’, *Proceedings of the Royal Society of London* **97**, 354–373. 51, 57
- Richtmyer, R. D. & Morton, K. W. (1967), *Difference methods for initial-value problems*, J. Wiley & sons. 69
- Rizk, N. K. & Lefebvre, A. H. (1983), ‘Influence of atomizer design features on mean drop size’, *AIAA Journal* **21**(8), 1139–1142. 29
- Roe, P. L. (1986), ‘Characteristic-based schemes for the Euler equations’, *Annual Review of Fluid Mechanics* **18**, 337–365. 212
- Sadeghizadeh, Z. & Drallmeier, J. A. (2018), ‘Effect of large amplitude waves and film inertia on mass separation at a sharp corner’, *Journal of Fluids Engineering* **140**(081301). 11, 30, 102, 103
- Sadeghizadeh, Z. & Drallmeier, J. A. (2019), ‘Effect of liquid viscosity and surface tension on mass separation of shear-driven liquid film at a sharp corner’, *International Journal of Multiphase Flow* **111**, 188–199. 30, 103
- Sander, W, a. W. B. (2008), ‘Direct numerical simulation and analysis of instability enhancing parameters in liquid sheets at moderate Reynolds numbers’, *Physics of Fluids* **20**, 053301. 80
- Sattelmayer, T. & Wittig, S. (1986), ‘Internal flow effects in prefilming airblast atomizers : mechanisms of atomization and droplet spectra’, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* **108**, 465–472. 29, 153, 156, 180

- Sauer, B., Sadiki, A. & Janicka, J. (2014), ‘Numerical Analysis of the Primary Breakup Applying the Embedded DNS Approach to a Generic Prefilming Airblast Atomizer’, *International Journal of Multiphase Flows* **6**(3), 179–192. 81
- Saurel, R. & Abgrall, R. (1999), ‘A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows’, *Journal of Computational Physics* **150**(2), 425–467. 76, 183, 184
- Saurel, R., Boivin, P. & Le Métayer, O. (2016), ‘A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flow’, *Computers & Fluids* **128**, 53–64. 77, 186, 187
- Saurel, R. & Pantano, C. (2018), ‘Diffuse-interface capturing methods for compressible two-phase flows’, *Annual Review of Fluid Mechanics* **50**, 105–130. 184, 187, 238
- Saurel, R., Petitpas, F. & Berry, R. A. (2009), ‘Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures’, *Journal of Computational Physics* **228**(5), 1678–1712. 77, 185, 186, 197
- Schiller, L. & Naumann, A. (1935), ‘A drag coefficient correlation.’, *Vdi Zeitung* **77**, 318–320. 115, 116, 169
- Schlichting, H. (1955), *Boundary Layer Theory*, McGraw Hill. 35
- Schmitt, T. (2020), ‘Large-Eddy simulations of the Mascotte test cases operating at supercritical pressure.’, *Flow, Turbulence and Combustion* **105**, 159–189. 18, 191, 221, 222
- Schönfeld, T. & Rudgyard, M. (1999), ‘Steady and Unsteady Flow Simulations Using the Hybrid Flow Solver AVBP’, *AIAA Journal* **37**(11), 1378–1385. 85
- Schulz-Rinne, C. W. (1993), ‘Classification of the Riemann problem for two-dimensional gas dynamics’, *SIAM Journal on Mathematical Analysis* **24**(1), 76–88. 229
- Schulz-Rinne, C. W., Collins, J. P. & Glaz, H. M. (1993), ‘Numerical solution of the Riemann problem for two-dimensional gas dynamics’, *SIAM Journal on Mathematical Analysis* **14**(6), 1394–1414. 229
- Senoner, J.-M. (2010), Simulation aux grandes échelles de l’écoulement diphasique dans un brûleur aéronautique par un approche Euler-Lagrange, PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 168, 169, 171
- Shanmugasadas, K. P., Chakravarthy, S. R., Narasimha Chiranthan, R., Sekar, J. & Krishnaswami, S. (2018), ‘Characterization of wall filming and atomization inside a gas-turbine swirl injector’, *Experiments in Fluids* **59**(10), 151. 9, 29, 43
- Smagorinsky, J. (1963), ‘General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment’, *Monthly Weather Review* **91**, 99–164. 58
- Soave, G. (1972), ‘Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state.’, *Chemical Engineering Science* **27**, 1197–1203. 190
- Spalding, D. B. (1953), ‘The combustion of liquid fuels’, *Symposium (International) on Combustion* **4**(1), 847–864. 32, 117

- Stapper, B. E., Sowa, W. A. & Samuelsen, G. S. (1990), ‘An Experimental Study of the Effects of Liquid Properties on the Breakup of a Two-Dimensional Liquid Sheet’, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* **114**, 39–45. 9, 39, 40, 41
- Steinhaus, B. C., Ghandhi, J. B. & Shedd, T. A. (2007), ‘Experimental investigation of liquid film stripping at a sharp corner’, *ILASS Americas, Proceedings of the 20th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. 101, 102
- Stokes, G. G. (1851), ‘On the effect of the inertial friction of fluids on the motions of pendulums’, *Transactions of Cambridge Philosophical Society* **9**, 8–23. 114, 115
- Stolz, S. & Adam, N. A. (1999), ‘An approximate deconvolution procedure for large-eddy simulation’, *Physics of Fluids* **11**(7), 1699–1701. 221
- Stoufflet, B., Périaux, J., Fezoui, F. & Dervieux, A. (1987), ‘Numerical simulation of 3-D hypersonic Euler flows around space vehicles using adapted finite element’, *AIAA Journal* **0560**. 214
- Strasser, W. & Battaglia, F. (2017), ‘The effects of prefilming length and feed rate on compressible flow in a self-pulsating injector’, *Atomization and Sprays* **27**(10), 1–19. 81
- Sussman, M. & Puckett, E. G. (2000), ‘A coupled level set and volume of fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows’, *Journal of Computational Physics* **162**, 301–337. 64, 81
- Sussman, M., Smereka, P. & Osher, S. (1994), ‘A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow’, *Journal of Computational Physics* **114**, 146–159. 64, 65
- Sweby, P. K. (1984), ‘High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws’, *SIAM Journal of Numerical Analysis* **21**(5), 995–1011. 212
- Tachibana, S., Saito, K., Yamamoto, T., Makida, M., Kitano, T. & Kurose, R. (2015), ‘Experimental and numerical investigation of thermo-acoustic instability in a liquid-fuel aero-engine combustor at elevated pressure : Validity of large-eddy simulation of spray combustion’, *Combustion and Flame* **162**, 2621–2637. 112
- Taylor, G. I. (1963), *The shape and acceleration of a drop in a high speed air stream*, The Scientific Papers of G. I. Taylor, ed. G. K. Batchelor, Vol. III, University Press, Cambridge. 169
- Tchen, C.-M. (1947), Mean value an correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid., PhD thesis, Delft University of Technology. 113
- Terashima, H. & Tryggvason, G. (2009), ‘A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows’, *Journal of Computational Physics* **228**, 4012–4037. 71
- Thorpe, S. A. (1969), ‘Experiments on the stability of stratified shear flows’, *Radio science* **4**(12), 1327–1331. 8, 35
- Tomé, M. F., Castelo, A., Murakami, J., Cuminato, J. A., Minghim, R., Oliveira, M. C. F., Mangiavacchi, N. & McKee, S. (2000), ‘Numerical simulation of axisymmetric free surface flows’, *Journal of Computational Physics* **157**, 441–472. 69

- Tomé, M. F. & McKee, S. (1994), ‘GENSMAC : A computational marker and cell method for free surface flows in general domains’, *Journal of Computational Physics* **110**, 171–186. 69
- Toro, E. F. (2009), *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : A practical introduction, third edition*, Springer. 206, 210
- Toro, E. F., Spruce, M. & Speares, W. (1994), ‘Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver’, *Shock Waves* **4**, 25–34. 208
- Tryggvason, G., Bunner, B., Esmaeeli, A., Juric, D., Al-Rawahi, N., Tauver, W., Han, J., Nas, S. & Jan, Y.-J. (2001), ‘A front-tracking method for the computations of multiphase flows’, *Journal of Computational Physics* **169**, 708–759. 71
- Tryggvason, G., Esmaeeli, A., Lu, J. & Biswas, S. (2006), ‘Direct numerical simulations of gas/liquid multiphase flows’, *Fluid Dynamics Research* **38**, 660–6817. 71, 72
- Tryggvason, G., Esmaeeli, A., Lu, J. & Biswas, S. (2011), ‘A robust front tracking method : verification and application to simulation of the primary breakup of a liquid jet’, *SIAM Journal on Scientific Computing* **33**(4), 1505–1524. 71, 72
- Tsui, Y.-Y., Lin, S.-W., Cheng, T.-T. & Wu, T.-C. (2009), ‘Flux-blending schemes for interface capture in two-fluid flows’, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **52**, 5547–5556. 63
- Tsukahara, T. & Kawamura, H. (2014), ‘Turbulent heat transfer in a channel flow at transitional Reynolds numbers’, *arXiv :1406.0959* . 86
- Turkel, E. (1987), ‘Preconditioned Method for Solving the Incompressible and Low Speed Compressible Equations.’, *Journal of Computational Physics* **72**, 277–298. 197
- Ubbink, O. & Issa, R. I. (1999), ‘A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes’, *Journal of Computational Physics* **153**, 26–50. 63
- Unverdi, S. O. & Tryggvason, G. (1992), ‘A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows’, *Journal of Computational Physics* **100**, 25–37. 70, 71
- Van der Waals, J. D. (1873), *Over de Continuïteit van den Gas- en Vloeistofoestand*, A. W. Sijthoff. 189, 190
- Van Der Waals, J. D. (1891), ‘Théorie moléculaire d’une substance composée de deux matières différentes’, *Archives Néerlandaise des Sciences exactes et naturelles, Série I* **24**, 1–56. 71
- Van Der Waals, J. D. (1893), ‘Thermodynamische theorie der capillariteit in deonderstelling van continue dichtheidsverandering’, *Verh K Akad Wet Amsterdam* pp. 1–8. 73
- Van Dyke, M. (1982), *Album of Fluid Motion*, Parabolic Press. 8, 35
- Van Leer, B. (1974), ‘Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second-Order Scheme.’, *Journal of Computational Physics* **14**, 361–370. 212

- Van Leer, B. (1979), ‘Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov’s method.’, *Journal of Computational Physics* **32**, 101–136. 210, 211
- Vanharen, J. (2017), High-order numerical methods for unsteady flows around complex geometries, PhD thesis, Institut national polytechnique de Toulouse. 231, 232
- Varga, C., Lasheras, J. & Hopfinger, E. (2003), ‘Initial breakup of a small-diameter liquid jet by a high-speed gas stream.’, *Journal of Fluid Mechanics* **497**(1), 405–434. 126
- Viozat, C., Held, C., Mer, K. & Dervieux, A. (2001), ‘On vertex-centered unstructured finite-volume methods for stretched anisotropic triangulations’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **190**, 4733–4766. 214
- Virepinte, J. F. (1999), Etude du comportement dynamique et thermique de gouttes en régime d’interaction dans le cas de jets rectilignes., PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l’Aéronautique et de l’Espace. 115, 116
- Von Helmholtz, H. (1868), ‘XLIII. On discontinuous movements of fluids’, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **36**(244), 337–346. 34
- Wang, Z., Fidkowski, K., Abgrall, R., Bassi, F., Caraeni, D., Cary, A., Deconinck, H., Hartmann, R., Hillewaert, K., Huynh, H., Kroll, N., May, G., Persson, P.-O., Van Leer, B. & Visbal, M. (2013), ‘High-order CFD methods : current status and perspective.’, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **72**, 811–845. 231
- Warnckle, K., Gepperth, S., Sauer, B., Sadiki, A., Janicka, J., Koch, R. & Baeur, H.-J. (2017), ‘Experimental and numerical investigation of the primary breakup of an airblasted liquid sheet’, *International Journal of Multiphase Flows* **91**, 208–224. 10, 81, 82, 84
- Warnckle, K., Sadiki, A. & Janicka, J. (2019), ‘New insights in the role of turbulence for simulating primary breakup of prefilming airblast atomization’, *29th Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* . 81
- Waypoint 2050 (2020), *Balancing growth in connectivity with a comprehensive global air transport response to the climate emergency*, Air Transport Action Group - ATAG . 8, 23, 24
- Weber, C. (1931), ‘Zum zerfall eines fluessigkeitsstrahles’, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **11**, 136–154. 121, 122
- Welch, J., Harlow, F. & Shannon, J. (1965), ‘The mac method - a computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surfaces’, *Technical report, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, LA-3425* . 68
- Wetherell, J. R. J., Garmory, A. & Skarysz, M. (2020), ‘Coupled level set volume of fluid simulations of prefilming airblast atomization with adaptive meshing’, *ASME Turbo Expo 2020 : Turbomachinery Technical Conference and Exposition, American Society of Mechanical Engineers* . 81
- Wheeler, A. A., Murray, B. T. & Schaefer, R. J. (1993a), ‘Computation of dendrites using a phase field model’, *Physica D* **66**, 243–262. 74

- Wheeler, A. A., Murray, B. T. & Schaefer, R. J. (1993b), ‘Kinks versus Shocks’, *Shock Induced Transitions and Phase Structures in General Media* pp. 185–229. 74
- White, F. M. (1991), *Viscous fluid flow*, McGraw-Hill, New-York. 130, 146
- Wood, A. (1930), *A textbook of sound*, G. Bell and Sons Ltd - London. 16, 185, 186, 195, 196
- Yecko, P., Zaleski, S. & Fullana, J.-M. (2002), ‘Viscous modes in two-phase mixing layers’, *Physics of Fluids* **14**, 4115. 35
- Youngs, D. L. (1982), ‘Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion’, *Numerical methods for fluid dynamics* **24**, 273–285. 63, 81
- Zhang, T. & Zheng, Y. (1990), ‘Conjecture on the structure of solutions of the Riemann problem for two-dimensional gas dynamics systems’, *SIAM Journal on Mathematical Analysis* **21**(3), 593–630. 229
- Zhang, Y., Jia, M., Duan, H., Wang, P., Wang, J., Lui, H. & Xie, M. (2017), ‘Experimental and numerical study of the liquid film separation and atomization at expanding corners’, *SAE Technical Paper* **01-0856**. 101, 103