



HAL
open science

Contribution à la modélisation de l'atomisation assistée par l'analyse de simulations haute-fidélité

Matthias Averseng

► **To cite this version:**

Matthias Averseng. Contribution à la modélisation de l'atomisation assistée par l'analyse de simulations haute-fidélité. Physique [physics]. Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), 2022. Français. NNT : 2022ESAE0044 . tel-04119166

HAL Id: tel-04119166

<https://hal.science/tel-04119166v1>

Submitted on 6 Jun 2023

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 Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace

**Présentée et soutenue par
Matthias AVERSENG**

Le 19 septembre 2022

**Contribution à la modélisation de l'atomisation assistée par
l'analyse de simulations haute fidélité**

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

Spécialité : **Dynamique des fluides**

Unité de recherche :

ISAE-ONERA EDyF Energétique et Dynamique des Fluides

Thèse dirigée par

Jean-Luc ESTIVALEZES et Davide ZUZIO

Jury

M. Pierre TRONTIN, Rapporteur

M. Stéphane VINCENT, Rapporteur

Mme Lisl WEYNANS, Examinatrice

M. David LE TOUZÉ, Examineur

M. Jean-Luc ESTIVALEZES, Directeur de thèse

M. Davide ZUZIO, Co-encadrant de thèse

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

ONERA Toulouse
2 Avenue Édouard Belin
31055 Toulouse Cedex 4

Manuscrit de thèse

Contribution à la modélisation de l'atomisation assistée par l'analyse de simulations haute fidélité

Directeur de thèse : Jean-Luc Estivalèzes (DMPE)

Co-directeur de thèse : Davide Zuzio (DMPE-MH)

Matthias AVERSENG

1^{er} décembre 2022

ONERA

Remerciements

La conclusion de cette thèse est pour moi l'occasion de remercier les personnes qui m'ont soutenu durant cette dernière et qui m'ont aidé à la terminer. N'étant pas de nature à m'étendre, mes remerciements, bien que succincts, n'en restent pas moins sincères.

Tout d'abord je souhaite remercier chaleureusement mon directeur de thèse et mon encadrant, Jean-Luc Estivalèzes et Davide Zuzio. J'espère ne pas avoir trop usé de votre patience dans cette rédaction de thèse et je tiens à vous remercier pour vos conseils ainsi que votre implication tout au long de ce doctorat. J'ai énormément appris à vos cotés et j'espère avoir pu vous apporter un petit quelque chose de votre coté.

D'autre part, je tiens à remercier les membres de mon jury de thèse, Lisl Weynans, Pierre Trontin, Stéphane Vincent et David Le Touzé d'avoir accepté de lire et d'évaluer mes travaux. Leurs retours écrits sur le manuscrit comme oraux durant la soutenance ont permis de bâtir une discussion constructive et enrichissante sur ce sujet très intéressant qu'est l'atomisation. Merci encore ! Je remercie également Pierre Gajan, Pierre Millan et Olivier Rouzeau pour leur accueil au sein de l'équipe DMPE-MH de Toulouse ainsi que leur effort pour que les doctorants puissent travailler dans les meilleures conditions possibles. Un merci tout particulier à Valérie Duplessis et Corinne Plantade pour leur disponibilité, leur bonne humeur et leur aide précieuse concernant les tâches administratives, si plaisantes.

Cette thèse aurait été beaucoup plus difficile sans la bonne ambiance qui régnait entre les doctorants de ce département. Je remercie chaleureusement les "anciens" : Thibault D., Loïc V.G., Vincent D., Swann T., Anthony D., Julien L. et Pierre D. pour les discussions totalement décorrelées de la science ainsi que les soirées et les histoires qui en découlent assez ahurissantes. Je tiens aussi à remercier les "nouveaux" : Nicolas P., Marc S., Alexis A. et Lola R. pour les discussions, la bonne ambiance et tournois de couinche aux enjeux internationaux !

Je n'oublie pas ceux de "ma promo" : Loïc A., Julien S.-J., Gaetan C., Damien T., Virgile C. et Pierre L. et les remercie pour les conversations légères qui permettent de s'aérer l'esprit lorsqu'on a la tête dans le guidon de la rédaction.

Une pensée pour tout le groupe "tudo bem" du Brésil (Anthony D., Fanny D., Baptiste T. et Jean-François P.). C'était une sacré expérience d'un point de vue scientifique et surtout extrascientifique. De supers souvenirs pour un super voyage avec une super team. Nota bene, la caipirinha fonctionne aussi avec de la fraise =).

Je pense aussi à la team du Lundi soir (Thibault X., Baptiste T., Aurélie E., Jean-François P. et Sophie A.) ainsi que plus généralement aux Teugs. Un groupe de gais lurons qui s'agrandit et poursuit l'aventure =). Sincèrement merci pour le support constant depuis toutes ces années ! J'ai également pu compter sur le soutien sans faille de ma famille et surtout de ma "belle-famille". Un remerciement paraît si peu comparé à votre aide, merci encore !!!

Enfin, le plus important des remerciements te revient, Aurélie, merci à Toi d'être là.

*Whether you believe you can do a thing or not,
you are right.*

Table (réduite) des matières

Introduction	1
I. Phénomènes physiques et modélisations de l'atomisation assistée	5
1. Historique et applications de l'atomisation assistée	7
1.1. Une définition de l'atomisation assistée	8
1.2. Tour d'horizon et enjeux des applications de l'atomisation assistée	8
1.3. Catégories d'injecteurs	14
2. Notions fondamentales et simulations	17
2.1. Compréhension du processus d'atomisation assistée	19
2.2. Approche numérique et modélisations	28
2.3. Simulations numériques de l'atomisation assistée	32
3. Origine et modélisation de la densité d'interface pour l'atomisation	47
3.1. Définitions et généralités	48
3.2. Modélisations avec hypothèses de phase dispersées	51
3.3. Modélisations sans hypothèses de phases dispersées	53
II. Outils numériques pour la simulation et l'analyse de l'atomisation assistée	65
4. Résolution directe des équations de Navier-Stokes diphasiques incompressibles avec le code DYJEAT	67
4.1. Contexte et origine	68
4.2. Modèle physique	68
4.3. Résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles en diphasiques sur un maillage décentré	69
4.4. Couplage avec les conditions de saut	77
4.5. Conditions aux limites	81
4.6. Intégration temporelle	81
4.7. Condition de stabilité temporelle	82
4.8. Conclusion	82
5. Algorithme de détection liquide	85
5.1. Contexte	86
5.2. La détection liquide dans les outils numériques	86
5.3. Fonctionnement de l'algorithme	87
5.4. Analyse et classification des structures	94
5.5. Validation de l'algorithme	96
5.6. Performance	100
5.7. Analyse d'un instant d'une simulation DNS d'atomisation assistée	102
5.8. Conclusion sur l'algorithme de détection liquide	105
III. Similitude par rapport à l'expérience et géométries	107
6. Objectifs, contexte expérimental et méthodologie de similitude	109
6.1. Objectifs des simulations numériques	110
6.2. Contexte expérimental	111

6.3. Points de fonctionnements et mesures d'expériences	112
6.4. Méthodologie de similitude	114
7. Résultats antérieurs et configurations géométriques	115
7.1. Résultats et validations antérieurs	116
7.2. Géométrie du domaine périodique	116
7.3. Géométrie du domaine réaliste	118
IV. Simulations et analyses de nappes liquides cisillées dans un domaine pé-	121
riodique	
8. Simulation et analyse du cas de référence	125
8.1. Choix des longueurs d'ondes	126
8.2. Nombres sans dimension et conditions initiales	128
8.3. Géométrie et maillage	128
8.4. Temps caractéristique	129
8.5. Observations du processus d'atomisation	129
8.6. Caractéristiques de l'atomisation	131
8.7. Diamètre caractéristique	134
8.8. Conclusion de l'étude du cas de référence	135
9. Influence des paramètres géométriques	137
9.1. Introduction	138
9.2. Effet de la résolution, Δ	138
9.3. Influence du cloisonnement vertical, L_y	144
9.4. Conclusion sur l'influence des paramètres géométriques	149
10. Étude en similitude par rapport à l'expérience	151
10.1. Introduction	152
10.2. Conservation des couples initiaux $MFR-We$	152
10.3. Effet du rapport des flux de quantité de mouvements, MFR	158
10.4. Influence du Weber, We	162
10.5. Conclusion des études réalisées en similitude par rapport aux expériences	167
11. Exploitations des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine pé-	169
riodique	
11.1. Corrélations comportementales	170
11.2. Paramétrage du modèle d'atomisation LES	174
11.3. Conclusion sur l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine périodique	183
V. Simulations et analyses de nappes liquides cisillées dans un domaine réaliste	185
12. Simulation du cas de référence	189
12.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	191
12.2. Géométrie et maillage	191
12.3. Calcul des longueurs d'ondes	192
12.4. Calcul du temps caractéristique	193
12.5. Observations du déroulement de l'atomisation	193
12.6. Caractérisation générale du processus d'atomisation	195
12.7. Suivi de structures liquides par longueur d'ondes d'émission	198
12.8. Caractérisation temporelle du processus d'atomisation	208

12.9. Analyse des gouttes sortantes	213
12.10 Comparaison avec l'expérience	216
12.11 Conclusion de l'étude du cas de référence	218
13. Influence des paramètres géométriques	221
13.1. Introduction	222
13.2. Géométrie et maillage	222
13.3. Longueurs d'ondes	223
13.4. Observations du déroulement de l'atomisation	224
13.5. Caractérisation des processus d'atomisation par paquet	226
13.6. Caractérisation des gouttes sortantes	229
13.7. Comparaison avec l'expérience	231
13.8. Conclusion sur l'influence des paramètres géométriques	232
14. Étude en similitude par rapport à l'expérience	233
14.1. Introduction	234
14.2. Nombres sans dimension et conditions initiales	234
14.3. Longueurs d'ondes	234
14.4. Observations du déroulement de l'atomisation	236
14.5. Caractérisation des processus d'atomisation par paquet	237
14.6. Analyse des gouttes sortantes	241
14.7. Comparaison avec l'expérience	243
14.8. Conclusion sur l'étude en similitude par rapport à l'expérience	244
15. Exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine réaliste	245
15.1. Comparaison avec les expériences	246
15.2. Paramétrage du modèle LES	253
15.3. Conclusion à propos de l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine réaliste	262
Conclusion générale	263
A. Compléments d'informations sur les études de nappe liquides cisailés dans un do- maine périodique	269
A.1. Analyse du cas de référence	269
A.2. Effet de la résolution, Δ	272
A.3. Influence du cloisonnement vertical, L_y	276
A.4. Conservation des couples initiaux $MFR-We$	279
A.5. Effet du rapport des flux de quantités de mouvements, MFR	282
A.6. Influence du Weber, We	286
A.7. Modification du rapport des densités, $\hat{\rho}$	290
B. Compléments d'informations sur l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes liquides cisailées dans un domaine périodique	299
B.1. Réjection des structures appliquée aux simulations en similitude	299
B.2. Weber à l'équilibre	300
C. Compléments d'information sur les études de nappes liquides cisailées dans un do- maine réaliste	303
C.1. Analyse du cas de référence	303
C.2. Effet de la géométrie, Δ et L_x	308
C.3. Étude en similitude, $MFR-We$	310
Table (exhaustive) des matières	313

TABLE (RÉDUITE) DES MATIÈRES

Liste des Figures	321
Liste des Tableaux	329
Nomenclature	331
Bibliographie	337
Résumé	351

Introduction

Contexte de l'étude

Afin de réduire l'impact environnemental de l'augmentation du trafic aérien prévue au cours des prochaines années, des normes de plus en plus strictes sont imposées aux avionneurs. Dans ce contexte, la réduction des émissions polluantes des turboréacteurs est un objectif difficile à atteindre car cette dernière nécessite une connaissance détaillée des nombreux phénomènes physiques mis en jeu dans une chambre de combustion. Parmi les différents axes de recherche, le contrôle de l'injection du carburant est un enjeu majeur. En pratique, cette étape est réalisée grâce à des injecteurs dont le rôle est de produire, sur une distance très courte, un brouillard de fines gouttelettes de manière à optimiser la combustion, c'est le processus d'atomisation, Figure 0.1.



FIGURE 0.1. – Injection cross-flow, Herrmann [77]

Le contrôle de cette désintégration est un enjeu majeur pour les motoristes, et ce pour plusieurs raisons : l'incrément de l'efficacité énergétique des moteurs et donc des aéronefs, l'allumage de la chambre de combustion en toutes conditions, la prévision des instabilités de combustion, qui permettrait d'éviter des dysfonctionnements induits par les fluctuations des écoulements et éventuelles sollicitations excessives des structures du moteur.

Au cours de cette dernière décennie, la simulation aux grandes échelles (LES), s'est récemment imposée comme l'outil de référence permettant d'effectuer des simulations détaillées et instationnaires de l'écoulement turbulent dans une chambre de combustion. Avec cette approche, le transport et l'évaporation du spray sont généralement bien décrits à l'aide de modèles dits à phase dispersée, permettant la prévision des régimes stables avec une bonne précision.

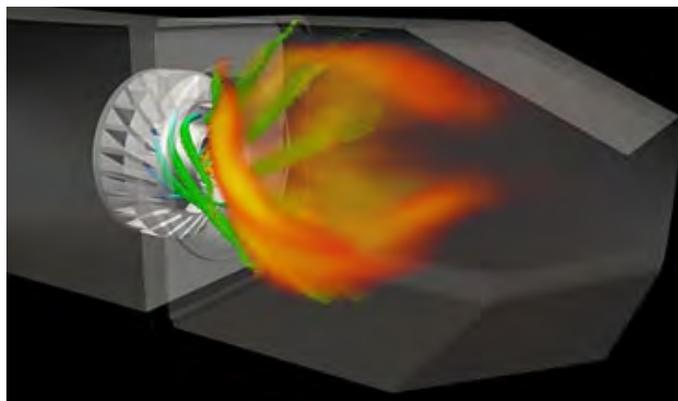


FIGURE 0.2. – Simulation LES d'une chambre de combustion, Dorey [50]

Cependant, les simulations réalisées au niveau industriel de chambres de combustion négligent les mécanismes de formation du spray : les gouttes sont directement injectées dans le domaine de calcul, les caractéristiques de l'instationnarité du processus d'atomisation ne sont pas prises en compte et des gouttes sont prédéfinies en utilisant les données expérimentales disponibles. Ceci limite fortement les capacités prédictives des simulations, en particulier dans le cas d'écoulements fortement instationnaires.

Objectifs de la thèse

L'objectif à long terme des études sur l'atomisation est de fournir la granulométrie, la distribution en taille et en vitesse des gouttes finales, avec une marge d'erreur minimale et sans avoir besoin d'effectuer d'expériences au préalable. Toutes ces conditions impliquent donc de bien prendre en compte toutes les étapes de l'atomisation.

Une piste pour simuler efficacement le processus complet est le couplage de deux types de modèles, adaptés aux différentes échelles du problème : un premier modèle, dit à phases séparées, qui permet de reproduire les plus grandes échelles du phénomène d'atomisation du jet liquide ; un second modèle dit à phase dispersée adapté à la description du spray. Un couplage de type two-way permet de transférer localement la phase liquide d'un solveur à l'autre, permettant de générer les gouttes en prenant en compte le comportement instationnaire de l'atomisation primaire. Cette méthodologie, appelée Large Scale Simulation (LSS), nécessite une modélisation de type sous-maille des caractéristiques des gouttes. En effet, la simulation à phases séparées (LES) n'est pas supposée résoudre l'écoulement jusqu'à la taille de la goutte, car le coût de calcul serait trop important. Un des objectifs de cette thèse est d'obtenir un modèle prédictif et instationnaire, pour le moment inexistant, de taille et vitesse initiales des gouttelettes numériques générées par l'atomisation assistée permettant le couplage entre les deux approches. En effet, une zone sous-résolue existe entre les zones dites à phases séparées et dispersées, où coexistent d'importants amas liquides (phase séparée) et de fines gouttelettes (phase dispersée). Cette zone tampon nécessite un effort de modélisation pour prendre en compte la physique des deux modèles précédents. Ce dernier apportera la brique manquante entre la zone d'atomisation primaire et la zone à phase dispersée.

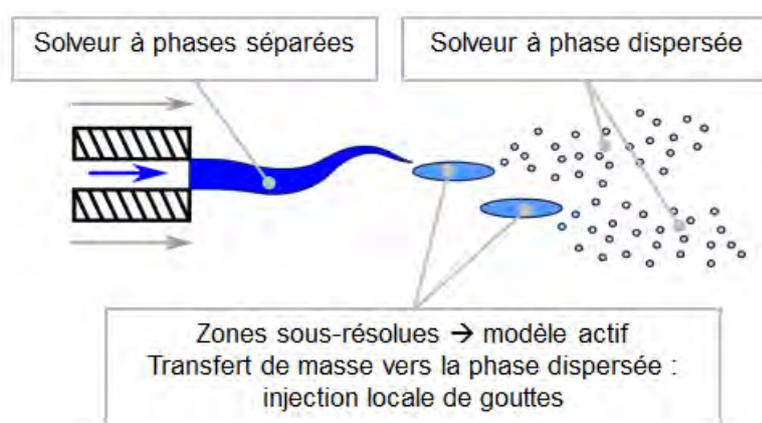


FIGURE 0.3. – Modélisation de l'atomisation

Pour comprendre les phénomènes régissant cette zone, le solveur direct des équations de Navier-Stokes DYJEAT de l'ONERA a été utilisé. Ce dernier a l'avantage d'être capable de reproduire des processus d'atomisations jusqu'à la taille des plus petites gouttes. Cependant ces simulations restent, en raison du coût, des outils dédiés à la compréhension des mécanismes d'atomisation : les domaines de calcul traités sont très réduits et les temps de restitution élevés.

Plan du manuscrit

Cette thèse se compose de cinq parties qui sont, à leur tour, réparties en plusieurs chapitres.

La première partie est composée des chapitres 1, 2 et 3, qui présentent l'atomisation assistée au sens large et décrivent les phénomènes physiques impliqués ainsi que les différentes modélisations possibles (notamment celles liées à la densité d'interface).

- Le chapitre 1 débute avec une définition succincte de l'atomisation assistée, de ses enjeux, de ses domaines d'applications ainsi que des dispositifs industriels les plus couramment utilisés pour la reproduire.
- Le chapitre 2 réalise un bref état de l'art concernant la compréhension des différentes étapes de ce processus. Cela va des instabilités interfaciales jusqu'aux différentes tentatives de classifications des régimes d'atomisations en passant par les nombres sans dimension couramment employés. Une description des approches numériques et des modélisations associées a été mentionnée avec des exemples illustrant les résultats accessibles.
- Le chapitre 3 retrace les origines du concept de densité d'interface, jusqu'aux mises en pratique les plus récentes dans le cadre de la simulation aux grandes échelles d'atomisation. Différentes modélisations basées sur l'hypothèse de phases dispersées ou non sont présentées avec les hypothèses et la constructions des termes sources associés.

La deuxième partie s'articule autour des chapitres 4 et 5 pour présenter les outils numériques utilisés dans ces travaux.

- Le chapitre 4 concerne le solveur DYJEAT et décrit le modèle physique ainsi que les méthodes numériques employées pour la discrétisation.
- Le chapitre 5 se concentre sur le développement de l'algorithme de détection liquide utilisé dans ces travaux, ses performances ainsi que son implémentation dans deux outils numériques : DYJEAT et ALGODETECT.

La troisième partie met l'accent sur les objectifs à atteindre durant cette thèse en mentionnant le contexte expérimental, les points de fonctionnements retenus et en décrivant les configurations géométriques utilisées dans les chapitres 6 et 7.

- Le chapitre 6 décrit l'objectif général de cette thèse en rappelant le contexte expérimental et les hypothèses associées. Les points de fonctionnements expérimentaux reproduits sont présentés ainsi que la méthodologie de similitude autour de laquelle s'articulent les simulations.
- Le chapitre 7 résume les résultats et validations des précédentes thèses dans laquelle s'inscrit ce travail. De plus, les deux configurations employées par la suite sont illustrées avec leurs domaines géométriques ainsi que leurs principales hypothèses.

La fin du chapitre 7 marque la division du manuscrit en deux parties correspondant à la simulation et l'exploitation des résultats issus des deux configurations géométriques précédemment citées. Ainsi la quatrième partie se concentre sur la simulation, l'analyse et la modélisation de l'atomisation ligamentaire dans une configuration géométrique n'employant que des conditions limites périodiques, chapitres 8, 9, 10 et 11.

- Le chapitre 8 met en place l'ensemble de l'analyse du processus d'atomisation sur le point de fonctionnement s'inspirant des expériences, désigné comme référence.
- Le chapitre 9 met en lumière l'influence de certains paramètres géométriques sur le processus d'atomisation en utilisant la méthodologie d'analyse du chapitre précédent.
- Le chapitre 10 illustre l'influence des nombres sans dimension sur le processus d'atomisation en comparant qualitativement les résultats obtenus avec ceux des expériences associées. De nouvelles simulations sont réalisées pour appuyer un potentiel découplage des effets induits par les nombres sans dimension initiaux sur le processus d'atomisation.
- Le chapitre 11 compile l'ensemble des résultats des simulations de nappes périodiques pour établir des corrélations comportementales. Suite à cela, un début de développement d'un modèle d'atomisation LES est effectué en se basant sur l'analyse temporelle des structures liquides émises.

La cinquième et dernière partie se concentre sur le dernier domaine géométrique employé, celui

de l'atomisation assistée dans une configuration réaliste avec injecteur, chapitres 12, 13, 14 et 15.

- Le chapitre 12 décrit le processus d'atomisation obtenu pour le point de fonctionnement de référence. Suite à cela, une nouvelle procédure d'analyse est décrite puis mise en place pour s'adapter aux phénomènes présents dans ce type de simulation.
- Le chapitre 13 se concentre sur l'influence de certains paramètres géométriques sur le processus d'atomisation en utilisant la méthodologie d'analyse du chapitre précédent.
- Le chapitre 14 décrit l'influence des nombres sans dimension sur le processus d'atomisation en comparant qualitativement et quantitativement les résultats obtenus de cette nouvelle analyse avec ceux des expériences.
- Le chapitre 15 compile l'ensemble de ces nouveaux résultats pour établir des corrélations comportementales s'inspirant des formulations établies dans l'étude des nappes périodiques. Le paramétrage d'un modèle d'atomisation LES est effectué en se basant sur ces nouvelles simulations et à partir de l'analyse des structures liquides émises.

Enfin, un bilan des résultats obtenus lors de cette thèse ainsi que des perspectives générales pour la poursuite de ces travaux sont présentés.

Première partie

Phénomènes physiques et modélisations de l'atomisation assistée

Historique et applications de l'atomisation assistée

Ce chapitre présente un récapitulatif historique des différents domaines d'utilisations de l'atomisation assistée.

Une liste non exhaustive des types d'injecteurs communément utilisés dans l'industrie et la recherche est présentée. Un accent particulier est mis sur deux types d'entre-eux, avec une description de leurs modes de fonctionnements, leurs secteurs d'utilisations et enfin leurs avantages et inconvénients.

Sommaire

1.1. Une définition de l'atomisation assisté	8
1.2. Tour d'horizon et enjeux des applications de l'atomisation assistée .	8
1.2.1. Peinture artistique et industrielle	8
1.2.2. Purification de produits pharmaceutiques, agro-alimentaires et céramiques	9
1.2.3. Poudre en métallurgie	9
1.2.4. Injection automobile	10
1.2.5. Combustion moteur aéronautique	11
1.2.6. Propulsion liquide dans le spatial	13
1.3. Catégories d'injecteurs	14
1.3.1. Injecteurs pressurisés	14
1.3.2. Injecteurs diphasiques de type airblast	15

1.1. Une définition de l'atomisation assisté

L'atomisation désigne le fait de fragmenter en une multitude d'ensembles distincts un corps initialement cohérent. Le terme assisté fait référence à la manière dont l'action va être menée à terme, c'est-à-dire, avec une action extérieure. Lorsque ces deux interprétations sont rassemblées, l'atomisation assistée désigne donc un procédé de fractionnement d'un corps initialement homogène en une pléthore de sous-ensemble au moyen d'une aide extérieure.

1.2. Tour d'horizon et enjeux des applications de l'atomisation assistée

1.2.1. Peinture artistique et industrielle

L'atomisation assistée pourrait être qualifiée de technique moderne mais prend ses racines dès les premières heures de la préhistoire dans le paléolithique supérieur avec l'art pariétal. En effet certaines peintures rupestres de cette époque ont été réalisées totalement ou en partie avec de l'argile soufflée après avoir été liquéfiées et mise en bouche. Les artistes de cette période sont donc les premiers à avoir utilisé le concept d'atomisation assistée. Une des premières oeuvres réalisée de cette manière est illustrée Figure 1.1. Des chevaux aux contours "floués" ainsi que des mains "négatives" sont visibles et caractéristiques du procédé dit de "soufflage", utilisant l'atomisation.



FIGURE 1.1. – Représentation "des chevaux ponctués" du Pech-Merle datant de -25 000 ans, [3].

Cette technique se modernisa jusqu'au pistolet à peinture de Binks en 1887. Ce dispositif était une pompe qui devant être actionnée à la main et possédait une buse de pulvérisation qui dispersait la peinture grâce au un récipient sous pression. Le milieu artistique comme industriel s'empara de ce concept pour sa simplicité, ses résultats excellents et le perfectionna tout en l'adaptant à ses propres desseins, Figures 1.2 et 1.3.



FIGURE 1.2. – Félines Fight Club, Krem 2014, [5]. FIGURE 1.3. – Thermolaquage de pièces, [8].

1.2.2. Purification de produits pharmaceutiques, agro-alimentaires et céramiques

L'industrie laitière développa le concept de tour de séchage dès 1800 pour purifier certains de ses produits. Toutefois, cette nouvelle technique ne fut employée industriellement qu'à partir de 1901 avec le brevet de Stauf puis en 1933 avec celui de Nyrop. Depuis sa création le principe de fonctionnement est resté le même, à savoir, maximiser la surface de contact des particules pour optimiser l'évaporation de leurs composants humides, Figure 1.4. Plus précisément, le produit, sous forme liquide, est pulvérisé en fines gouttelettes dans une enceinte cylindrique verticale. Ensuite, ces gouttes se retrouvent en contact avec un courant d'air chaud dont le but est d'évaporer, éliminer le pourcentage d'eau restante. Enfin, la poudre obtenue est entraînée par le flux de chaleur jusqu'à un cyclone ou un filtre à manche qui sépare l'air de la poudre.

Plusieurs techniques sont utilisées pour produire des fines gouttelettes. La première utilise des turbines qui fragmentent et éjectent le liquide en fines gouttelettes sous l'effet de la force centrifuge. Un autre emploi des buses dans lequel le liquide, véhiculé sous pression, s'auto-pulvérise en passant au-travers de l'orifice de sortie. Enfin, la plus courante des méthodes employées utilise un jet d'air comprimé à haute vitesse qui a pour rôle de déstabiliser le liquide.

Ce procédé, a été utilisé par une multitude de corps industriels, pharmaceutiques, biotechnologiques, agroalimentaires, chimie, cosmétiques et céramiques, pour obtenir des produits purifiés, fins et concentrés.

1. Entrée de l'air
2. Chauffage de l'air
3. Pulvérisateur de liquide
4. Atomisation du liquide
5. Mélange poudre/vapeur d'eau
6. Séparation des deux phases
7. Évacuation de la vapeur d'eau
8. Collection de la poudre

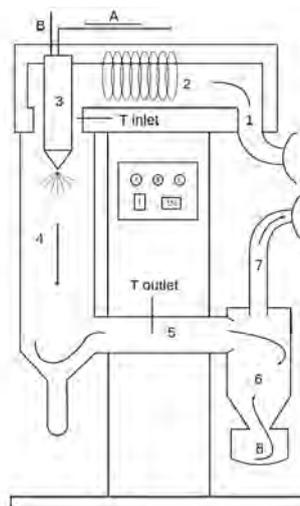


FIGURE 1.4. – Schématisation d'une tour de séchage, [10].

Néanmoins, le contrôle des risques industriels imposé par la réglementation ATEX (ATmosphères EXplosives) impose une maîtrise de plus en plus précise de l'ensemble du système d'exploitation. Cela implique une meilleure connaissance des processus d'atomisations.

1.2.3. Poudre en métallurgie

Dès le début des années 1960, l'industrie métallurgique s'est intéressée à la production de poudres métalliques et à la technique du frittage pour produire de l'acier aux aptitudes améliorées. En effet, à contrario de la métallurgie classique qui utilise la fusion et solidification de métaux pour réaliser des pièces, la métallurgie des poudres emploie une technique d'atomisation pour créer une grande quantité de particules métalliques. Ces dernières sont ensuite soumises au frittage afin de les rassembler, les souder, pour former les pièces finales. Ce procédé permet d'obtenir des aciers plus performants avec des capacités améliorées. De plus, cette technique permet d'obtenir de nouveaux alliages et aciers spéciaux, impossible à réaliser par un procédé de fusion conventionnelle. Aujourd'hui, la métallurgie des poudres est une technologie qui intervient aussi bien dans l'automobile que dans l'aérospatiale, l'industrie électrique ou encore l'horlogerie.

Le principe d'obtention de telles poudres est le même dans chacun de ses secteurs, Figure

1.5. Tout d'abord, les matières premières sont chauffées et brassés jusqu'au point de fusion. Lorsque le mélange est parfaitement homogène, l'alliage dans sa phase liquide s'écoule dans une chambre où sa fragmentation commence sous l'action d'un puissant écoulement gazeux (gaz neutre tel de l'argon, azote) ou liquide (eau). Cela permet de refroidir rapidement les gouttelettes de métal produites qui sont devenues parfaitement homogènes et exemptes d'impuretés. Lorsque les poudres sont créées et recueillies dans une capsule le frittage commence. Cela consiste à comprimer sous de hautes températures des particules qui vont s'agglomérer sous forme de billettes (grande barre) d'acier, exemptes de toute impureté ou d'inclusion.

En 2014 l'ONERA s'est équipé d'une tour d'atomisation dont les caractéristiques sont uniques en France, Figure 1.6. Pour être transformé en poudre, le métal fondu est atomisé par de l'argon. Plus précisément, un anneau injecte le gaz sur la goutte de métal en train de tomber dans la cuve. Sous l'effet de forces aérodynamiques, celle-ci éclate en de fines gouttelettes qui se solidifient avant de s'écraser sur les parois de la cuve.

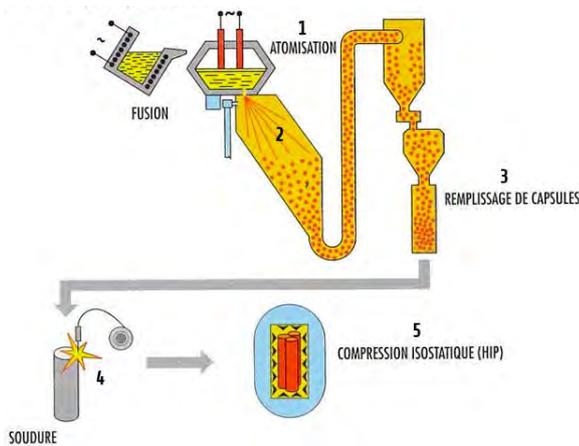


FIGURE 1.5. – Création des poudres, [4].

FIGURE 1.6. – Tour d'atomisation ONERA, [9].

Ce type de dispositif industriel ressemble aux tours de séchages précédemment décrites. Le même type de contrôle s'y applique, avec la réglementation ATEX (ATmosphères EXplosives) qui impose une maîtrise de l'ensemble des risques potentiels du dispositif et donc implique une meilleure connaissance des processus d'atomisations.

1.2.4. Injection automobile

Dès 1673, Huygens et Papin, démontrent le principe du moteur à combustion et explosion à Paris. En effet, leur expérience consistait à déplacer un piston entraînant une charge de 70 kg sur 30 cm, en chauffant un cylindre métallique vidé d'air et rempli de poudre à canon. Par la suite, grâce aux développements des procédés et technologies le premier moteur à une cylindrée fut réalisée par Barsanti et Matteucci en 1856 jusqu'aux plus récents avec le moteur Diesel en 1893. La complexité des moteurs ainsi que leurs variétés n'a cessé d'augmenter depuis cette époque. Néanmoins, en dépit des innovations et des différentes technologies, la manière d'injecter le carburant est restée sensiblement la même. En effet, l'injecteur véhicule et éjecte du carburant à haute vitesse et haute pression au-travers de ses orifices de sorties, ce qui provoque une perturbation et une fragmentation de son corps liquide. Ainsi le carburant éjecté se retrouve à l'état de spray de gouttelettes prêt à brûler, Figure 1.7. Le lieu de cette injection diffère selon le type d'injection. Si c'est une injection directe (configuration la plus courante) alors le spray se retrouve directement dans le cylindre (chambre de combustion), Figure 1.8 tandis que si l'injection est indirecte le type de moteur influence le positionnement de l'injection. Dans le cas de moteur essence les injecteurs sont placés avant la soupape d'admission, soit dans la tubulure d'admission. Concernant les moteurs diesel, les injecteurs sont placés juste après la soupape d'admission, mais en dehors du cylindre.

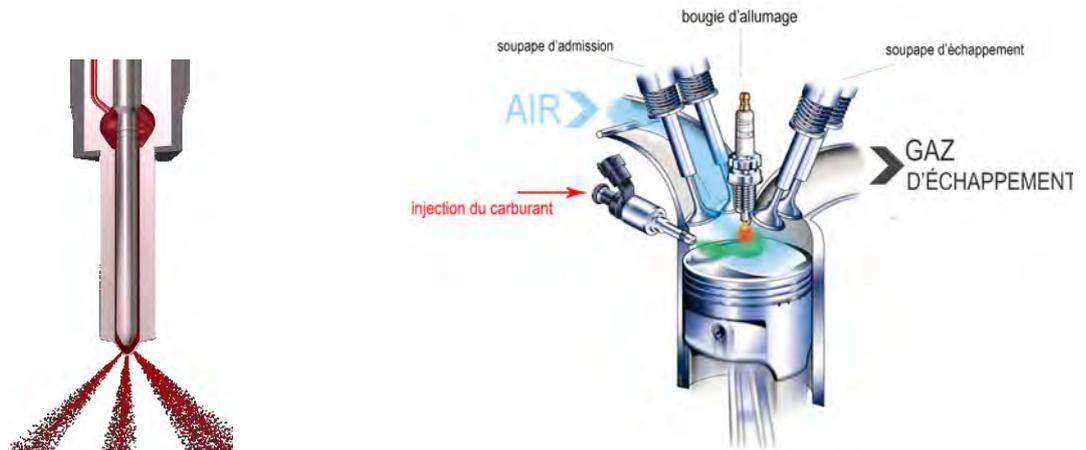


FIGURE 1.7. – Injecteur et spray résultant. FIGURE 1.8. – Moteur essence injection directe, [6].

Le secteur du transport était la première source des émissions de CO₂ en France en 2017 (30 %), dont la quasi-totalité (95 %) était liée au transport routier. Les premiers objectifs en matière de limitation des émissions de gaz à effet de serre concernant le marché des véhicules neufs, ont été fixés en 2009, à l'échelle européenne, avec une mise en application définie entre 2012 à 2020. Ce règlement fait suite au protocole de Kyoto de 1997 qui définit aussi l'objectif des 95 g de CO₂/km pour 2020, Figure 1.9. À la suite de l'accord de Paris de 2015 (dans le cadre de la COP21), l'Union Européenne a défini des objectifs à atteindre en matière d'émissions de CO₂ dans le domaine du transport jusqu'en 2030, 15 % de réduction dès 2025 et jusqu'à 37.5 % de réduction d'ici à 2030 par rapport à 2021.

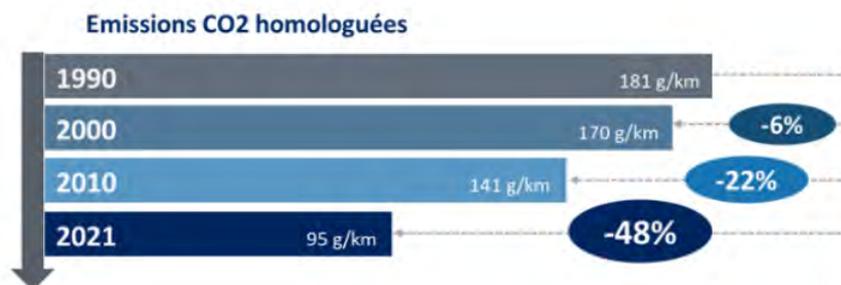


FIGURE 1.9. – Objectif de réduction des émissions de CO₂ d'après CCFA, [7].

Cette forte volonté de réduction des polluants émis pousse les constructeurs à optimiser dès la conception leurs nouveaux véhicules afin d'être le moins polluants possibles en service. Une dynamique de recherche et d'innovation autour de cette problématique est lancée depuis plusieurs années, notamment sur la compréhension des phénomènes d'atomisation assistée qui jouent un rôle clé.

1.2.5. Combustion moteur aéronautique

Le premier turboréacteur, présenté comme turbopropulseur, fut réalisé par Coandă en 1910. Lors de son premier vol d'essai, son inventeur et pilote coupa rapidement le moteur surpris par la puissance du moteur. Néanmoins, l'inertie bien plus importante que pour un moteur à hélice, fit quand même décoller l'avion qui, privé de propulsion, atterrit brutalement et brûla partiellement. Ce fut le début des turboréacteurs qui se perfectionnèrent dès 1930 avec les constructions, en parallèle, de Whittle [179] et Von Ohain, précurseur des turboréacteurs d'aujourd'hui.

De nos jours, les turboréacteurs équipent la grande majorité des avions de lignes civiles et sont des machines d'une extrême complexité regroupant un grand nombre de sous-systèmes, Figure 1.10. L'un des plus cruciaux est assurément la chambre de combustion, qui assure la génération

de gaz chaud à haute vitesse pour la poussée en s'appuyant sur la combustion du kérosène. Pour cela, et indépendamment du type de chambre de combustion (annulaire, directe etc), plusieurs injecteurs sont positionnés au sein de celle-ci et ont pour rôle de l'alimenter en carburant, Figure 1.11. Les injecteurs effectuent cette alimentation tout en perturbant le corps liquide jusqu'à sa fragmentation grâce à une entrée d'air comprimé (sortant des compresseurs basses et hautes pressions). Sous l'effet de forts cisaillements et de turbulences, cette déstabilisation du carburant va produire de gros paquets liquides qui eux-même se re-scinderont et se stabiliseront en un spray de petites gouttes pour une combustion optimale.

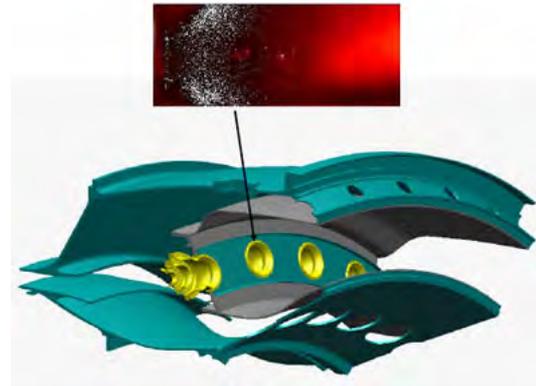
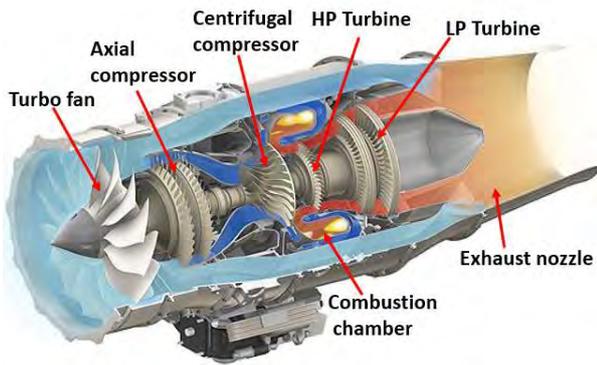


FIGURE 1.10. – Composants d'un turbo-réacteur, Lakshya [93].

FIGURE 1.11. – Simulation d'une chambre de combustion annulaire de l'ONERA, [2].

D'un point de vue environnemental, le secteur aérien représente 2 % des émissions mondiales de CO₂ avec des prévisions d'augmentation du trafic aérien de l'ordre de 5 % par an (estimations réalisées avant la pandémie COVID). C'est pourquoi, depuis 2016, de nouvelles certifications développées par le Comité pour la Protection de l'Environnement en Aviation (CAEP) sous la supervision de l'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (OACI) ont pour objectif de fortement réduire les émissions polluantes des avions. L'objectif affiché va au-delà de la neutralité en carbone à partir de 2020 puisqu'une réduction des émissions de CO₂ de 50 % entre 2005 et 2050 est visée, Figure 1.12.

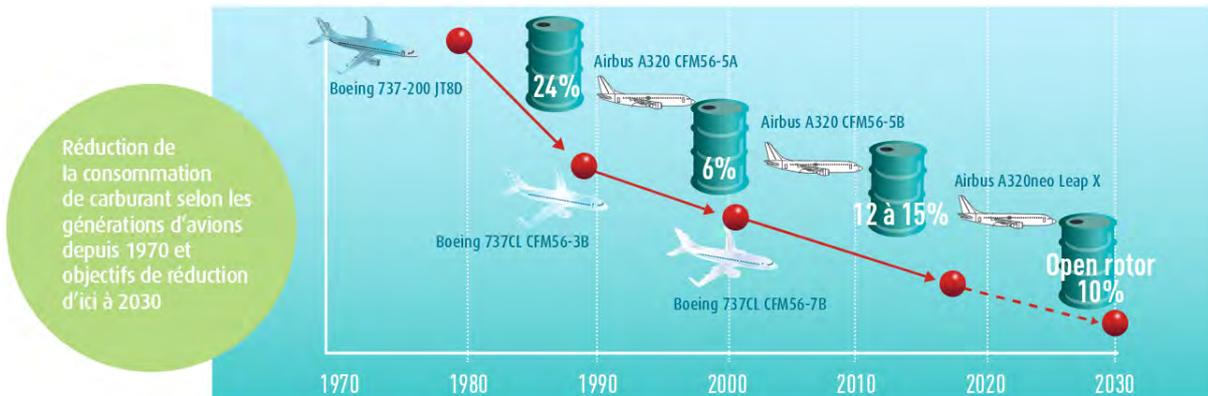


FIGURE 1.12. – Objectif de réduction des émissions de CO₂, [1].

Un des moyens d'atteindre ces objectifs de réduction est la maîtrise technologique de l'ensemble des sous-systèmes et notamment ceux au sein de la chambre de combustion. De cette constatation découle une nécessité d'avoir une compréhension plus poussée de l'atomisation assistée.

1.2.6. Propulsion liquide dans le spatial

La propulsion liquide, largement utilisée dans le secteur spatial, repose entièrement sur le principe de l'atomisation assistée. Le pionnier de la propulsion liquide fut Paulet, d'après Romero [151], qui réalisa le premier moteur-fusée à ergols liquide à Paris en 1897, soit 29 ans avant celui de Goddard en 1926. Plus généralement, le perfectionnement et la mise au point des moteurs-fusées à ergols liquides a débuté dans les années 1920 et a reçu une première application opérationnelle avec le missile allemand V2 en 1943.

De nos jours, un des plus connus se trouve être le Vulcain équipant le lanceur Ariane 5 de l'agence spatiale européenne (ESA), Figure 1.14. Ce moteur se situe à l'étage principal cryogénique (EPC) composé principalement des réservoirs d'ergols liquide, et utilise le couple d'ergols cryotechniques oxygène-hydrogène ($O_2 - H_2$) ayant les meilleures performances propulsives.

Les moteurs à propulsion liquide sont utilisés dans le secteur du spatial pour leurs nombreux avantages. Le premier concerne leurs potentiels ré-allumages, ce qui leur octroie une grande marge de manœuvre durant leurs fonctionnements ou les phases de tests. Ensuite, leurs poussées sont variables mais aussi contrôlables en temps réel, ce qui permet d'être flexible et précis pour la mise en orbite des charges utiles et à moindre coût. Toutes ces raisons font que ce type de moteur est logiquement mis en place dans le dernier étage des lanceurs.

Tout les moteurs à propulsions liquides fonctionnent sensiblement de la même manière, seuls les couples d'ergols varient. Concernant le Vulcain, Figure 1.13, lors de la sortie d'un injecteur cryogénique coaxial, la grande différence de vitesse entre les deux phases (oxygène (CO_2) en phase liquide et l'hydrogène (H_2) en phase gazeuse) déstabilise l'oxygène liquide éjecté qui en se rompant génère de gros paquets liquides propulsés vers le flux gazeux d'hydrogène. Ces mêmes paquets liquides subissent une deuxième rupture pour finir en un spray de petites gouttelettes d'oxygène liquide, principalement sphériques. Par la suite, les gouttes résultantes sont dispersées par l'écoulement gazeux turbulent et enfin vaporisées pour alimenter la combustion.



FIGURE 1.13. – Vulcain 2, [11].

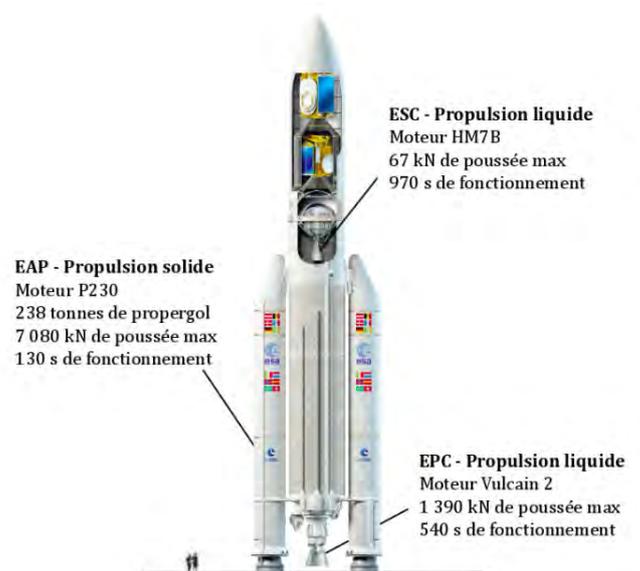


FIGURE 1.14. – Ariane 5 ECA de Arianespace.

Les prix de mises en orbite d'un kilogramme de charge utile sont très élevés et varient entre 5 000 et 19 000 dollars. Du fait de ce coût excessif tous les systèmes embarqués sont optimisés pour minimiser les charges inutiles. Cela s'applique aux systèmes propulsifs, c'est pourquoi des recherches intensives sont régulièrement effectuées pour améliorer la compréhension de l'atomisation dans la propulsion liquide.

1.3. Catégories d'injecteurs

Au cours du développement de l'industrie, différents systèmes d'injection de carburant ont été imaginés, créés puis utilisés pour répondre à des besoins spécifiques. Comme mentionné dans la section 1.2, leurs utilisations s'étendent sur une large gamme d'activités, allant de la peinture à la propulsion spatiale. Néanmoins, en dépit de cette grande variété d'utilisation, Lefebvre and McDonell [102] ont proposé une classification de ces dispositifs. Pour cela, plusieurs familles d'injecteurs furent déterminés en fonction du type de source d'énergie employé pour pulvériser le liquide.

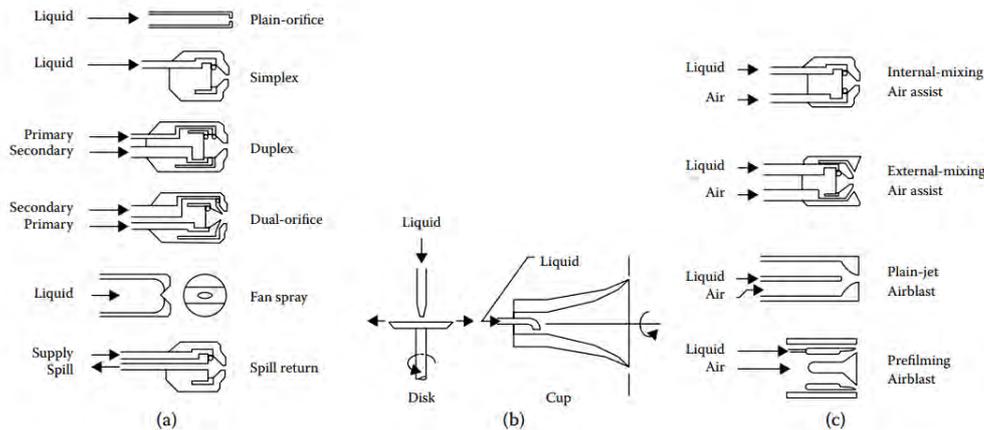


FIGURE 1.15. – Classification des injecteurs : (a) Injecteurs pressurisés, (b) Injecteurs rotatifs, (c) Injecteurs diphasiques, Lefebvre and McDonell [102].

Lefebvre and McDonell [102] mettent en évidence trois catégories. Tout d'abord, les injecteurs pressurisés, propulsant du liquide directement à haute vitesse. Ensuite, les injecteurs diphasiques, qui utilisent un jet gazeux comprimé à haute vitesse pour perturber le liquide sortant à basse vitesse. Enfin, les injecteurs rotatifs qui utilisent les forces centrifuges pour accélérer le liquide jusqu'à sa fragmentation lors de sa sortie dans le milieu au repos.

Une description plus précise des injecteurs pressurisés et diphasiques a été faite ci-dessous sections 1.3.1 et 1.3.2. En effet, pour des raisons différentes, leurs utilisations sont bien plus commune dans les secteurs de l'automobile, du spatial et de l'aéronautique.

1.3.1. Injecteurs pressurisés

Ce type d'injecteur est l'un des plus anciennement utilisé pour de nombreuses raisons. Tout d'abord, son simple mode de fonctionnement repose sur un gradient de pression entre le réservoir liquide et la sortie. Cela signifie que le carburant s'écoule vers le milieu au repos, au-travers de petits orifices et à grande vitesse. Cette éjection à haute vitesse dans un milieu de plus faible pression va perturber le liquide, créant et amplifiant des instabilités surfaciques. Ces dernières vont générer des paquets liquides (ligaments) qui, en se détachant du corps principal, vont continuer à se fragmenter jusqu'à atteindre l'état stable définissant le brouillard de gouttes final. De plus, les caractéristiques du spray formé sont directement reliées au gradient de pression, c'est-à-dire qu'un contrôle de la granulométrie émise est possible. Enfin, en raison de leur simple mode de fonctionnement, ces injecteurs sont relativement peu onéreux. Leur coût de fabrication est relativement faible. Pour toutes ces raisons, les injecteurs pressurisés sont largement répandus dans l'industrie comme le milieu agricole, l'aéronautique, l'automobile et le spatial. Néanmoins, cette contrôlabilité de la granulométrie peut être son principal inconvénient. En effet, maintenir la pressurisation d'un réservoir peut rapidement devenir très énergivore, surtout lorsque la granulométrie voulue est fine. A cela s'ajoute les contraintes de sécurité et de maintenance liées à l'exploitation de systèmes hydrauliques, surtout dans des engins critiques tel que les avions, les

fusées etc..

A contrario du secteur automobile et agricole, les injecteurs pressurisés ne sont utilisés qu'occasionnellement dans le secteur aéronautique et spatial. Par exemple, en aéronautique leurs présences restent nécessaires lors de phases transitoires tel que le démarrage, le redémarrage en altitude et le bas régime, soit lorsque les autres dispositifs ne sont plus opérationnels.

1.3.2. Injecteurs diphasiques de type airblast

Mis au point et maîtrisés beaucoup plus récemment que les dispositifs pressurisés, les injecteurs diphasiques de type airblast présentent de sérieux avantages et peuvent être vus comme complémentaires des précédents.

Leurs fonctionnements dépendent entièrement de l'apport énergétique transmis par la phase gazeuse et sa capacité à déstabiliser le liquide lentement éjecté. En effet, l'énergie nécessaire à la fragmentation du liquide est amenée via un jet gazeux à forte vitesse prélevé en sortie des étages de compression du turboréacteur. Ce fort courant d'air va impacter, cisailer et entraîner le carburant sortant à faible vitesse dans la chambre de combustion. Des instabilités vont naître puis croître à l'interface liquide-gaz avec, en parallèle, une oscillation plus générale du corps liquide principal. La superposition de tous ces phénomènes va conduire à la rupture de paquets liquides, appelés ligaments, qui sous l'action d'instabilités surfaciques et de la turbulence générée vont encore une fois se rompre pour former le brouillard de gouttes final.

Contrairement aux dispositifs pressurisés qui ont besoin d'un réservoir sous pression, les injecteurs airblast prélèvent directement leurs sources d'énergies nécessaires en sortie des compresseurs. Pour cette raison, ces dispositifs sont moins énergivores et moins contraignants pour l'intégration tout en permettant de pulvériser de plus grands débits de carburant.

Néanmoins, lors de certaines situations leur fonctionnement n'est plus nominal, ni même assuré. C'est le cas lors de phases transitoires en aéronautique, lors de démarrage, redémarrage en altitude et bas régime lorsque l'alimentation en gaz n'est pas optimale. Pour pallier ce défaut intrinsèque les motoristes ont rajouté, en complément, des injecteurs pressurisés pour les phases transitoires avec des injecteurs airblast pour les phases nominales. Ainsi les deux types de dispositifs sont complémentaires, effectuant leurs rôles durant leurs phases de prédilections. L'inconvénient de cette complémentarité du système d'injection est forcément le sur-coût engendré en masse mais aussi en terme de maintenance.

Notions fondamentales et simulations

Ce chapitre décrit, plus précisément, l'état de l'art actuel dans la compréhension de l'atomisation assistée ainsi que les différents moyens numériques utilisés pour la reproduire. Ce chapitre va se découper en plusieurs parties.

La première partie débute par une illustration représentant les principales étapes de l'atomisation d'une nappe liquide. Vient ensuite une description générale des différentes instabilités surfaciques avec leurs modélisations. La description générale de l'atomisation continue avec le détail des nombres sans dimensions couramment employés. Enfin, plusieurs classifications de régimes d'atomisation sont illustrés en fonction de l'avancement de la fragmentation et aux moyens de nombres sans dimensions.

La deuxième partie présente les manières les plus couramment employées pour reproduire numériquement le développement de l'atomisation. Cela commence par la modélisation des équations générales de Navier-Stokes jusqu'aux possibles manières de les résoudre.

Pour finir, un distinguo est fait entre les simulations résolvant directement l'écoulement (DNS) de celles utilisant des modèles phénoménologiques. Tout d'abord, une description formelle des principales méthodes numériques de résolution pour les simulations DNS est effectuée avec des exemples de réalisations. Enfin parmi les approches phénoménologiques se situent les corrélations, modèles stochastiques ainsi que des modèles plus complexes tels qu'ELSA. Un bref récapitulatif de différentes corrélations, modélisations et simulations stochastiques est présenté ci-dessous avec en conclusion une description sommaire du modèle ELSA.

Sommaire

2.1. Compréhension du processus d'atomisation assistée	19
2.1.1. Instabilités interfaciales	19
2.1.1.1. Composante longitudinale	19
2.1.1.2. Composante transverse	21
2.1.2. Nombres adimensionnels	23
2.1.3. Classification des régimes d'atomisations	23
2.1.3.1. Régimes d'atomisations primaires	23
2.1.3.2. Régimes d'atomisations secondaires	26
2.2. Approche numérique et modélisations	28
2.2.1. Modélisation des équations de Navier-Stokes	28
2.2.1.1. Formalisme DNS	30
2.2.1.2. Formalisme LES	30
2.2.1.3. Formalisme RANS	31
2.3. Simulations numériques de l'atomisation assistée	32
2.3.1. Simulation numérique directe, DNS	32
2.3.1.1. Suivi d'interface	32
2.3.1.2. Capture d'interface	33
2.3.1.3. Exemples d'applications	34
2.3.2. Approches phénoménologiques	39
2.3.2.1. Approches stochastiques	39
2.3.2.1.1. Corrélations d'Elkottb	39

2.3.2.1.2.	Corrélation d’Hiroyasu	39
2.3.2.1.3.	Modèle Taylor Analogy Breakup	40
2.3.2.1.4.	Modèle WAVE	41
2.3.2.1.5.	Simulations avec modèles stochastiques	43
2.3.2.2.	Modèle ELSA	44

2.1. Compréhension du processus d'atomisation assistée

L'atomisation, définie de manière plus précise, est le fait de fragmenter en fines gouttelettes une masse liquide initialement sous forme continue. Pour réaliser cela une augmentation de l'énergie propre du liquide est nécessaire afin de perturber et vaincre ses forces de cohésion liées à sa tension de surface. Ce surcroît d'énergie est apporté par la phase gazeuse qui est amenée à grande vitesse dans la chambre de combustion. Le cisaillement induit par cette différence de vitesse liquide-gaz va provoquer la déstabilisation du corps liquide et provoquer la naissance d'instabilités de type Kelvin-Helmholtz [74, 90] le long de l'écoulement. Ces ondes vont se développer et croître très rapidement induisant une oscillation globale du corps liquide.

À la suite des instabilités longitudinales de Kelvin-Helmholtz viennent celles de Rayleigh-Taylor. Celles-ci conduisent à l'apparition d'ondes transverses au sens de l'écoulement et sont responsables de la formation et la création de ligaments. L'apparition de ces dernières concluent la première phase appelée atomisation primaire. Sous l'effet de l'écoulement aérodynamique, ces grosses entités liquides vont se déstabiliser, s'étirer jusqu'à se fragmenter en fines gouttelettes sous l'effet de l'instabilité de Rayleigh-Plateau, pour constituer le brouillard final qui est la phase ultime appelée atomisation secondaire, Figure 2.1

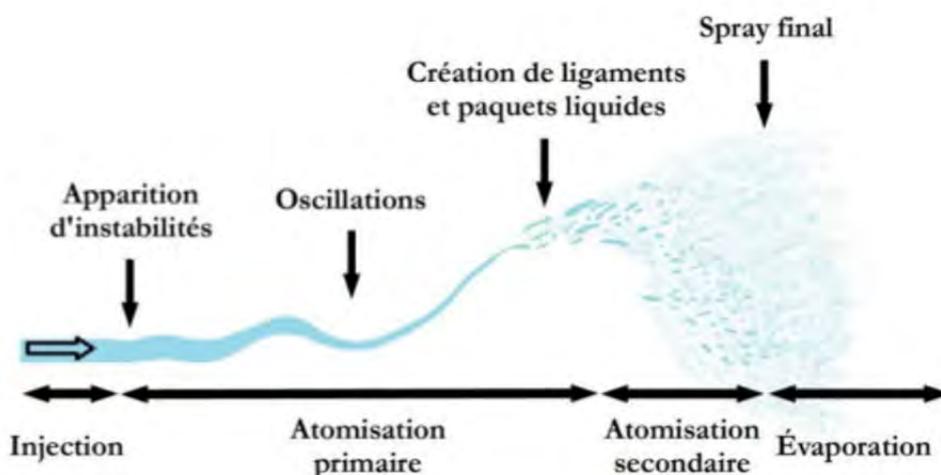


FIGURE 2.1. – Étapes lors de l'atomisation assistée d'une nappe liquide par un courant d'air, Marter-Lagrange [116].

2.1.1. Instabilités interfaciales

Plusieurs observations expérimentales ont mis en lumière l'émergence et l'amplification d'ondes longitudinales et transverses au niveau de l'interface liquide-gaz lorsqu'un corps liquide était soumis à un courant d'air cisailant. Ces constatations furent la source d'une multitude de travaux à la fois sur la modélisation mais aussi sur l'analyse de tels phénomènes. En effet, au moyen de ces hypothèses, le but était de caractériser ces perturbations pour déterminer leurs origines ainsi que leurs propriétés, Eggers [55], Marmottant and Villermaux [115], Savart [155, 156, 157], Plateau [137], Kelvin [90], Helmholtz [74], Rayleigh [145], Rayana [144].

2.1.1.1. Composante longitudinale

La première des perturbations constatée fut celle se déplaçant dans le même sens que l'écoulement. La nappe étant entourée par un courant d'air éjecté à haute vitesse, celui-ci va agir sur cette dernière au-travers de forces aérodynamiques. En effet, la grande différence de vitesse entre le gaz et le liquide est la source du cisaillement liquide. Ce dernier va provoquer des instabilités inter-faciales dites de Kelvin-Helmholtz [90, 74] qui se manifestent par la formation de vagues

transverses à l'écoulement liquide et progressant axialement le long du corps liquide. Ces différentes vagues vont modifier localement la pression ainsi que la vitesse de l'écoulement, Figure 2.2.

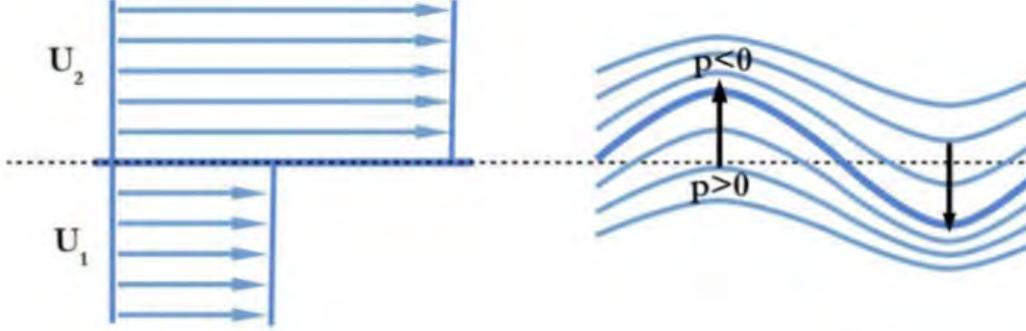


FIGURE 2.2. – Évolution de l'interface entre deux écoulements, Charru [34].

Pour déterminer une expression analytique caractérisant le développement de cette perturbation, des analyses de stabilité linéaire ont été effectuées. Cela consiste à linéariser les équations de la dynamique des fluides (équation de continuité, équation d'Euler ou de Navier-Stokes selon les hypothèses) en prenant en compte les conditions de continuités et cinématique à l'interface, sans oublier les conditions aux limites. La perturbation de l'interface initiale (η) peut se mettre sous la forme :

$$\eta(x, y, z, t) = \hat{\eta}(x, y, z, t)e^{i(kv_x + \omega t)} \quad (2.1)$$

Sachant que les nombres kv et ω sont à priori complexes. Les travaux de Raynal [146] utilisèrent la théorie temporelle pour simplifier cette expression. Cette dernière associe une perturbation de vitesse sinusoïdale spatiale avec une amplification, amortissement temporel. Les travaux de Raynal font l'hypothèse que les oscillations de surface, η , sont de la forme :

$$\eta = \eta_{init} e^{ikv_x + \omega t} = \eta_{init} e^{\omega_{reel} t} e^{ikv_x} e^{i\omega_{im} t} \quad \text{avec} \quad \omega = \omega_{reel} + i\omega_{im} \quad (2.2)$$

Les indices (\cdot_{reel}) et (\cdot_{im}) désignent les parties réelles et imaginaires d'un complexe. Sachant que η_{init} est l'amplitude de la perturbation initiale, kv représente le vecteur d'onde et ω la pulsation complexe. Le taux d'amplification est noté ω_{reel} , la longueur d'onde $\lambda = \frac{2\pi}{kv}$ et la fréquence de l'instabilité f tel que $f = \frac{\omega_{im}}{2\pi}$. Raynal [146] étudia plusieurs configurations de raccord de vitesses entre les phases, Figure 2.3, et démontra que la configuration optimale était celle avec un seul raccord de vitesse dans la phase gazeuse.

La longueur d'onde déduite de l'analyse de stabilité pour une surface plane est :

$$\lambda_{ax} \sim C \delta_{cl} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad \text{avec} \quad C = \frac{2\pi}{1.5} \quad (2.3)$$

Raynal [146] démontra, dans le cas d'une interface plane, que la modélisation du profil de vitesse par une rampe d'épaisseur $\delta_{cl} = \delta_\omega$ donnait des fréquences, vitesses de groupe et taux de croissance d'instabilité en bon accord avec les résultats expérimentaux. Pour cette raison l'épaisseur de vorticit  du gaz, δ_ω , est calculée de la manière suivante :

$$\delta_\omega = \frac{U_g - U_l}{\left. \frac{dU}{dy} \right|_{\max}} \quad (2.4)$$

Grâce à cette dernière, l'expression finale pour le calcul de la longueur d'onde de l'instabilité axiale, λ_{ax} , est :

$$\lambda_{ax} \sim C \delta_\omega \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad (2.5)$$

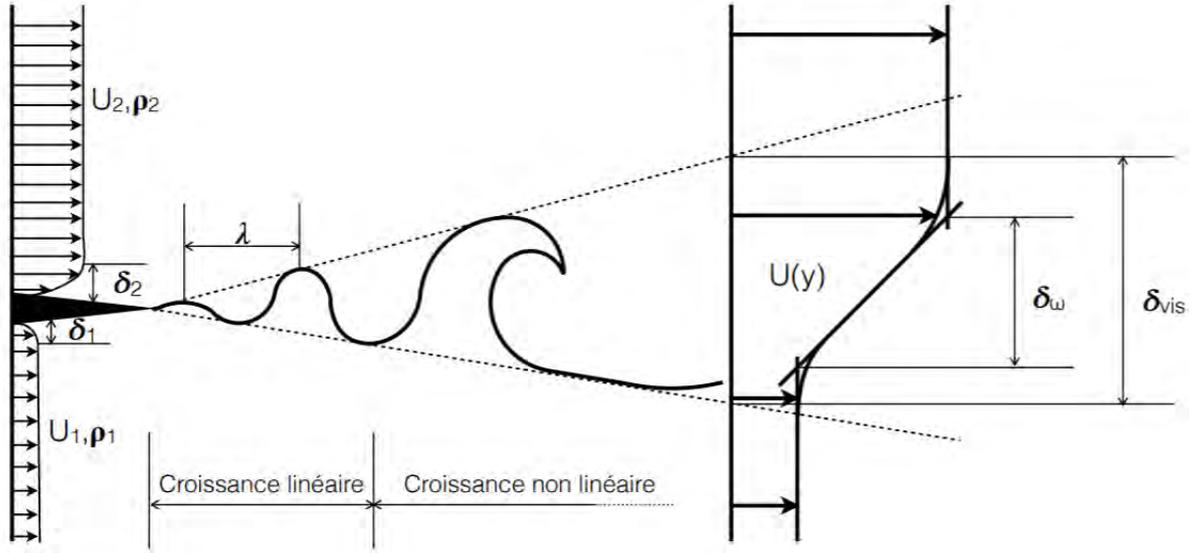


FIGURE 2.3. – Couche de mélange, Raynal [146].

Plus récemment, Marmottant and Villermaux [115] ainsi que Rayana [144] ont précisé cette expression avec une estimation du coefficient C plus adéquate à leurs dispositifs expérimentaux :

$$\lambda_{ax} = CD\delta_w \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad \text{avec} \quad C = \frac{2\pi}{1.5} \quad \& \quad D = 0.4 \quad (2.6)$$

Ainsi, grâce à la vitesse de groupe, U_{gr} , issue des travaux de Dimotakis [49] et de l'expression de l'instabilité axiale λ_{ax} , la fréquence de passage f de passage des instabilités à une abscisse donnée est :

$$U_{gr} = \frac{\sqrt{\rho_l}U_l + \sqrt{\rho_g}U_g}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_g}} \quad f = \frac{U_{gr}}{\lambda_{ax}} \quad (2.7)$$

2.1.1.2. Composante transverse

Durant l'atomisation primaire d'un liquide cisailé, les instabilités longitudinales provoquent la naissance de vagues, qui favorisent la création d'ondes transverses, Figure 2.4. La superpositions de l'ensemble de ces phénomènes est à l'origine des éjections d'amas liquides du corps principal tel que des sacs, ligaments etc..

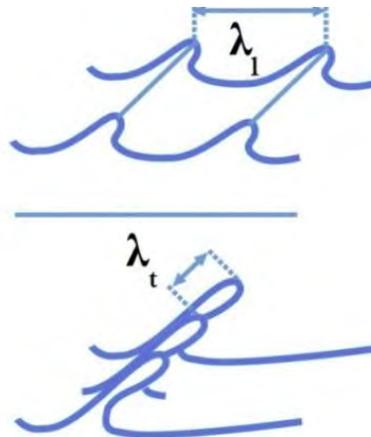


FIGURE 2.4. – Formation des instabilités longitudinales et transverses, Hong [81].

Plusieurs modélisations ont été effectuées pour représenter ce comportement. Lasheras and Hopfinger [96] proposent une formation ligamentaire basée sur des instabilités capillaires. D'un autre coté, Marmottant and Villiermaux [115] font l'hypothèse que cette composante transverse est induite par l'accélération des vagues développées par l'instabilité initiale de Kelvin-Helmholtz. Finalement Hong et al. [82] ainsi que Varga et al. [174] suggèrent que cette perturbation transverse est reliée à l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Le passage d'une onde à la surface du liquide accélère celui-ci et crée une instabilité de type Rayleigh-Taylor lorsque l'accélération est dirigée vers le liquide, Figure 2.5.

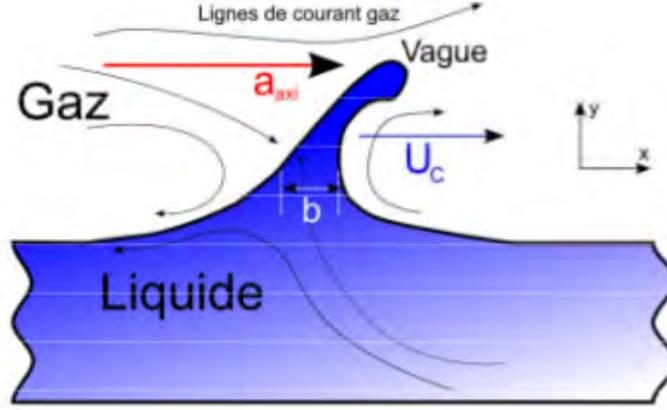


FIGURE 2.5. – Accélération d'une vague, coupe transversale de l'écoulement, Hong [81].

D'après Hong et al. [82], cela débute lorsque les vagues formées par l'instabilité axiale pénètrent dans le jet gazeux à haute vitesse. Chaque crête est ainsi soumise à une importante pression dynamique qui engendre une forte accélération axiale. Cette dernière provoque une déstabilisation du sommet des vagues où des ondulations apparaissent. En se développant, ces dernières vont générer des doigts, puis des ligaments. La longueur d'onde la plus amplifiée pour une instabilité du type Rayleigh-Taylor, λ_{tr} , est :

$$\lambda_{tr} = 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{\rho_l a}} \quad (2.8)$$

Cette longueur d'onde dépend de l'accélération axiale maximale des vagues, a , qui est estimée à partir d'un bilan des forces aérodynamiques.

$$F = ma = \frac{1}{2} C_D \rho_g (U_g - U_{gr})^2 S \quad \text{avec} \quad m = \rho_l \delta S \quad (2.9)$$

Avec m la masse liquide accélérée, S la surface liquide normale à la force aérodynamique et $\delta = b$, l'épaisseur de la vague, Figure 2.5. L'expression de l'accélération est donc :

$$a = \frac{1}{2} \frac{C_D}{\delta} \frac{\rho_g}{\rho_l} (U_g - U_{gr})^2 \quad (2.10)$$

En supposant que cette épaisseur liquide δ est proportionnelle à la longueur d'onde axiale :

$$\delta = B\lambda_{ax} = BC\delta_\omega \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad (2.11)$$

L'expression de la longueur d'onde transverse devient :

$$\lambda_{tr} = 2\pi \sqrt{\frac{6BC}{C_D}} \delta_\omega \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\rho_l (U_g - U_{gr})^2 \delta_\omega}{\sigma} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2.12)$$

2.1.2. Nombres adimensionnels

De manière générale, pour analyser des écoulements possédant une interface, plusieurs nombres sans dimensions sont utilisés. Ces derniers dépendent des propriétés des fluides analysés et leur but est d'obtenir et d'identifier des lois de comportements ainsi que des régimes de fonctionnements. L'étude de Fernández et al. [60] démontre que le rapport du flux de quantité de mouvement, MFR , est un indicateur efficace pour classifier les régimes d'atomisation :

$$MFR = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2} \quad (2.13)$$

Avec ρ la densité, U la vitesse et les indices $(.l)$ et $(.g)$ désignent les phases liquides et gazeuses. Par ailleurs le nombre de Reynolds Re , au sens général, est lui aussi utilisé dans la littérature pour décrire l'atomisation. Ses deux versions, Re_l pour le liquide et Re_g pour le gaz, traduisent le rapport entre les forces dynamiques et les forces de viscosités :

$$Re = \frac{\rho U d}{\mu} \quad (2.14)$$

Ici μ représente la viscosité dynamique et d une longueur caractéristique, en général liée à l'injection du liquide. Enfin le nombre de Weber, We , représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces de tension de surface.

$$We = \frac{\rho_g U^2 d}{\sigma} \quad (2.15)$$

Le diamètre de la goutte est noté ici d et la tension de surface σ . Le nombre d'Ohnesorge, Oh , illustre le rapport des forces visqueuses avec la tension superficielle et les forces d'inerties.

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma d}} \quad (2.16)$$

Enfin les rapports de densités $\hat{\rho}$, et de viscosité dynamiques $\hat{\mu}$, sont largement utilisés en simulations numériques.

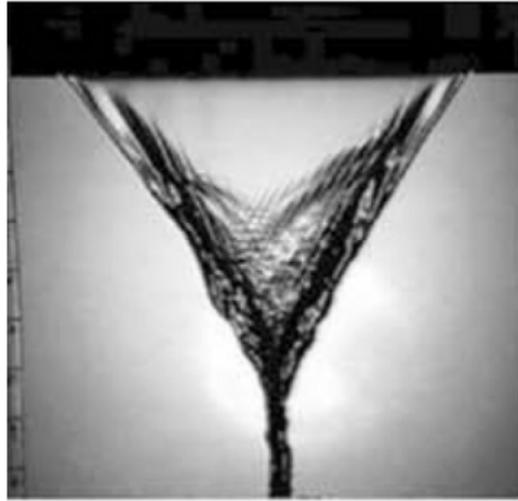
$$\hat{\rho} = \frac{\rho_g}{\rho_l} \quad \hat{\mu} = \frac{\mu_g}{\mu_l} \quad (2.17)$$

2.1.3. Classification des régimes d'atomisations

2.1.3.1. Régimes d'atomisations primaires

L'atomisation primaire est un phénomène complexe qui dépend de paramètres aussi bien physiques (propriétés des fluides) que géométriques (dimensions de l'injecteur). C'est pourquoi une multitude de régimes d'atomisations ont été mis en évidence, Carentz [31], Carvalho et al. [32], Larricq-Fourcade [95], Park et al. [132] et Stapper and Samuelsen [164]. La première des classifications fut réalisée par Mansour and Chigier [112, 113] qui mirent en évidence des différences de comportements en fonction des vitesses d'écoulement des deux phases.

Lorsque l'écoulement d'air est nul ($U_g=0$), les deux bords de la nappe se rapprochent jusqu'à converger sous l'action de la tension de surface, Figure 2.6. Par ailleurs, des perturbations surfaciques apparaissent lorsque la vitesse liquide (U_l) augmente, ce qui laisse supposer une transition laminaire-turbulent mais toujours sans aucune création de goutte, ni plus généralement d'atomisation. Lorsque cette même vitesse liquide augmente des trous apparaissent et s'élargissent sans produire de gouttes. L'atomisation ne commence que lorsqu'un écoulement gazeux est mis en place. Ce qui confirme que le cisaillement, ou plus globalement, qu'un apport d'énergie à la phase liquide est nécessaire pour commencer l'atomisation.


 FIGURE 2.6. – Nappe U_l faible et U_g nul, Carvalho et al. [32]

En reprenant l'analyse de stabilité de Squire [163], Figure 2.7, Mansour and Chigier [113] ont établi une classification en trois régimes, A B et C, Figure 2.8.

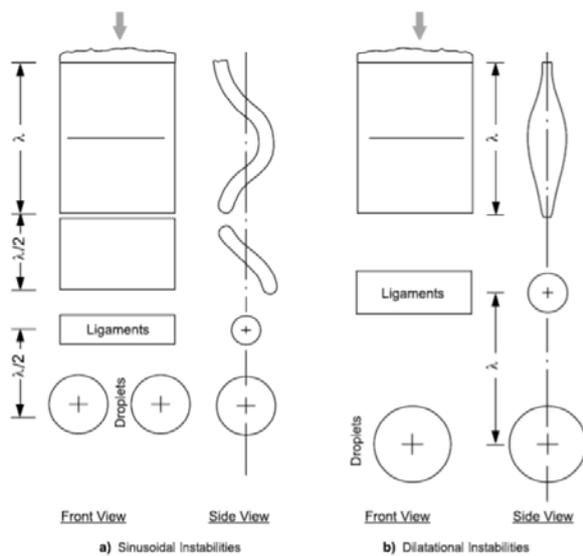


FIGURE 2.7. – Modes d'oscillations, Squire [163].

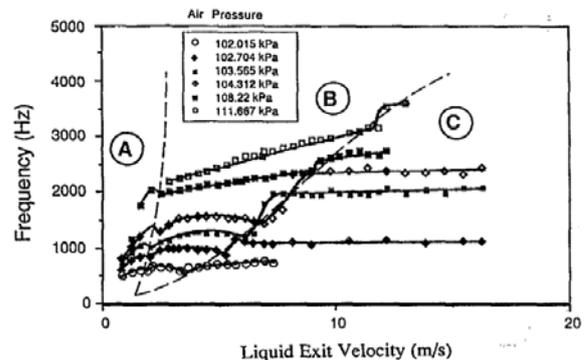


FIGURE 2.8. – Classification d'atomisation primaire, Mansour and Chigier [113].

D'après leurs observations expérimentales, les régions A et B sont caractérisées par une surface liquide vibrant en phase et périodiquement. A contrario, durant la transition de la zone B à C, des modes d'oscillations secondaires apparaissent de type sinuieux et variqueux tandis que dans la zone C les modes variqueux sont dominants.

Plus récemment, Dumouchel [52] fit une classification des régimes d'atomisations pour plusieurs configurations géométriques (jet rond, nappe liquide) avec et sans cisaillement gazeux. Son étude compile des travaux s'intéressant aux classifications d'atomisations et établit plusieurs régimes en fonction du rapport des vitesses des phases U_g/U_l . Dans le cas plus précis de nappe cisillée Lozano et al. [106, 107, 108] se sont intéressés à la déstabilisation de celle-ci ainsi qu'à l'effet de l'épaisseur de la nappe liquide sur le comportement de l'atomisation. Pour cela, leurs travaux mettent en avant l'utilisation du ratio de quantité de mouvement couplé au ratio des épaisseurs du canal de sortie air-liquide. Finalement Fernández [58] démontra une possible décomposition de l'atomisation en fonction du nombre MFR , Figure 2.9.

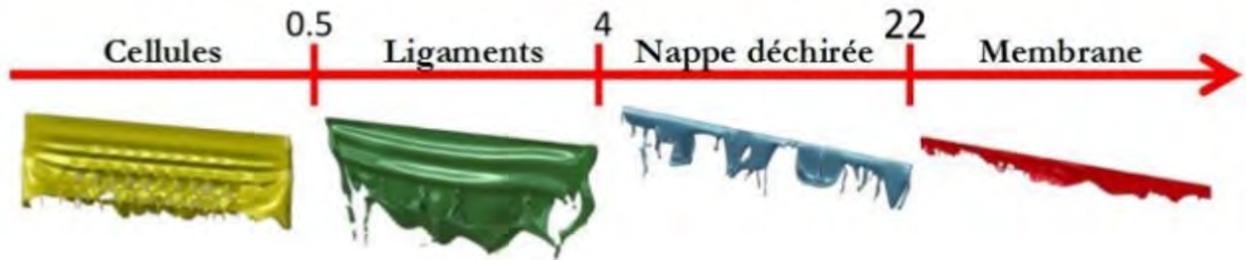


FIGURE 2.9. – Classification des régimes d'atomisations, Fernández [58].

- **Cellular break-up regime, $MFR \leq 0.5$**

Pour les faibles valeurs du rapport MFR la surface de la nappe est déstabilisée par des ondes sinusoïdales et variégues ayant un faible taux de croissance, Figure 2.11. L'apport d'énergie à la nappe, au-travers du cisaillement, n'est pas suffisant, ce qui implique une longueur de rupture importante ainsi qu'un angle de spray faible. Cette rupture est causée par la croissance de ligaments longitudinaux et transversaux formant des structures en cellules. Par ailleurs Stapper and Samuelsen [164] ont nommé ce régime cellular break-up regime, régime de rupture en cellules, Figure 2.10.

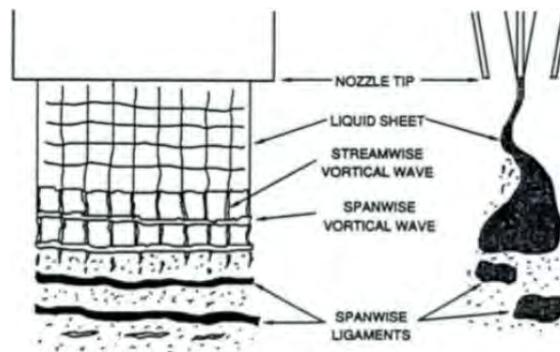


FIGURE 2.10. – Atomisation cellulaire de Stapper and Samuelsen [164].

- **Stretched streamwise ligament break-up regime, $0.5 < MFR \leq 4$**

Dans ce régime, les structures créées les plus courantes sont des ligaments. Cela s'explique par le fait que l'écoulement, au-travers du cisaillement, amplifie les instabilités longitudinales au détriment des transversales. La nappe bat avec une grande amplitude due à la croissance rapide des ondes longitudinales sous forme sinusoïdales et produit donc un grand angle de spray lors de son atomisation. L'atomisation des ligaments génère principalement des gouttes tandis que la longueur de rupture de la nappe est faible. Stapper and Samuelsen [164] ont nommé ce régime stretched streamwise ligament break-up regime, régime d'atomisation par ligaments, Figure 2.11.

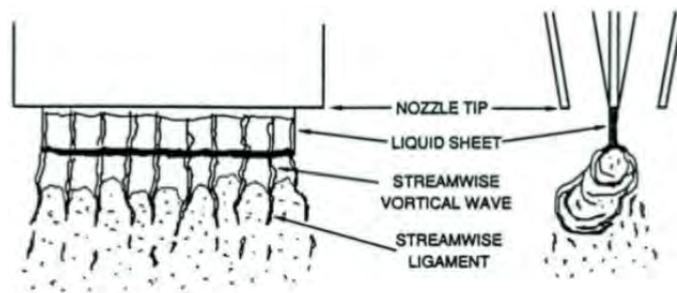


FIGURE 2.11. – Atomisation ligamentaire de Stapper and Samuelsen [164].

- **Torn-sheet break-up regime, $4 < MFR \leq 22$**

Ce régime est caractérisé par la grande disparité des formes de nappe. En effet, celle-ci est fortement cisailée par l'écoulement gazeux et différentes structures locales se forment, telles que des ligaments ou des cellules, qui sont immédiatement atomisés. La longueur de rupture n'est pas facilement mesurable car la nappe peut fortement varier d'aspect d'un instant à l'autre. Ce régime est nommé *torn-sheet break-up regime*, atomisation en nappe déchirée, à cause de son caractère assez chaotique.

- **Membrane break-up regime, $22 < MFR$**

Les travaux de Fernández [58] ont mis en évidence ce dernier régime d'atomisation. Lorsque l'écoulement est suffisamment rapide, la nappe redevient plus régulière en formant une membrane à la sortie de l'injecteur. La longueur de rupture est faible mais beaucoup plus facilement mesurable que pour le régime d'atomisation précédent. Ce régime est nommé *membrane break-up regime*, atomisation en membrane.

Finalement, la plus récente des classifications est celle de Lozano et al. [109] qui se base sur la mesure de fréquences, d'angles de spray et du comportement général de la nappe. Cette dernière établit six régimes différents. Les classifications précédentes sont reprises avec des régimes intermédiaires.

2.1.3.2. Régimes d'atomisations secondaires

La compréhension complète de l'atomisation primaire n'est pas achevée car ce processus est le fruit d'une multitude de paramètres couplés entre-eux. Cependant, l'atomisation secondaire, la déstabilisation ainsi que la création de gouttes à partir de structures liquides est beaucoup mieux connue, Hsiang and Faeth [83], Berthoumieu et al. [22], Reitz and Lee [150]. Dès 1987, cette caractérisation commença avec Pilch and Erdman [135] qui étudièrent la pulvérisation de gouttes. Leurs travaux mentionnent des corrélations entre le diamètre final des gouttes produites ainsi que leurs temps de ruptures tout en mettant en évidence l'importance des nombres de Weber et d'Ohnesorge. Cinq régimes d'atomisation différents sont mis en évidence, Figure 2.12.

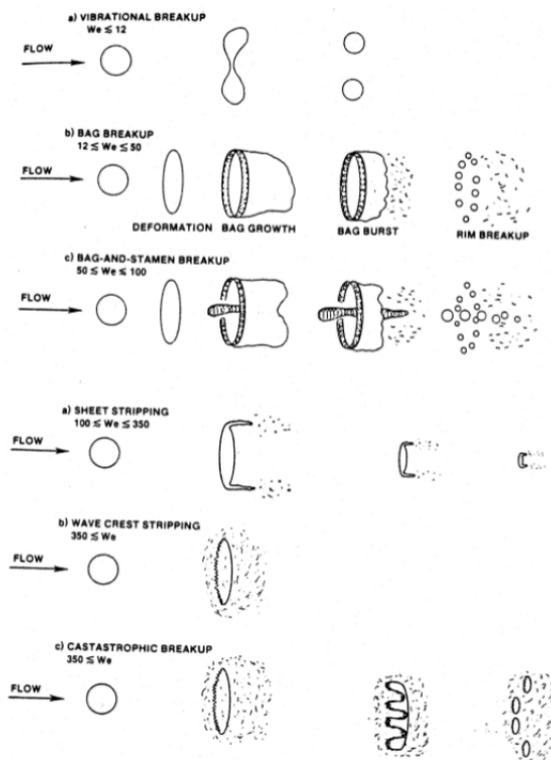


FIGURE 2.12. – Classification d'atomisation secondaire, Pilch and Erdman [135].

- **Vibrational break-up regime, $We \leq 12$**

C'est le premier mode de rupture qui apparaît quand le nombre de Weber est relativement faible, $We \leq 12$. La goutte commence à vibrer sous l'action du champ aérodynamique à sa propre fréquence. Cette vibration peut s'amplifier et mener à une rupture du corps principal en gouttes plus petites. Ces vibrations et ruptures s'opèrent sur des temps beaucoup plus longs que les modes suivants.

- **Bag breakup regime, $12 < We \leq 50$**

L'écoulement agit sur la déstabilisation de la goutte puisque celle-ci s'aplatit en créant une fine membrane reliée à un anneau. Cette membrane est alors soufflée et se désintègre en petites gouttes et l'anneau en gouttes de diamètres plus grands.

- **Bag and stamen break-up regime, $50 < We \leq 100$**

Plusieurs points de ce régime d'atomisation sont similaires avec le précédent. La formation de la couronne ainsi que celle de la membrane sont identiques. Néanmoins, une colonne liquide s'ajoute au centre de la couronne. La membrane est la première à se rompre suivie de la couronne puis de la colonne liquide.

- **Sheet stripping regime, $100 < We \leq 350$**

Le mécanisme d'atomisation est différent des précédents car ce dernier se déroule sur les bords de la goutte. En effet, une fine "feuille" liquide est étirée depuis les bords de la goutte. Des bouts liquides sont arrachés et s'atomisent en gouttelettes juste en aval. Durant tout ce processus, une goutte résiduelle est visible jusqu'à l'atomisation complète de tout le liquide.

- **Wave crest stripping regime, $350 < We$**

Pour des nombres de Weber plus grand, de petites longueur d'ondes avec de larges amplitudes, se forment du côté de la goutte exposée à l'écoulement. Des vagues apparaissent suite à cette déstabilisation et leurs crêtes sont continuellement érodées par l'action de l'écoulement sur la surface de la goutte.

- **Catastrophic break-up regime, $350 < We$**

Des longueurs d'ondes plus grandes se développent dans la goutte, provoquant une rupture de cette dernière en plusieurs paquets liquides. Ces paquets sont ensuite fortement déstabilisés par l'écoulement et s'atomisent suivant le régime précédent, Wave crest stripping.

Par ailleurs, Hsiang and Faeth [83] ont établi leur propre classification et analysé plus précisément le passage du régime Bag break-up à Sheet stripping, Figure 2.13.

D'après Hsiang and Faeth [83], la manière de se fragmenter diffère selon les changements de forme de goutte. En effet, sous l'action de l'écoulement la goutte change de forme. Sa partie convexe se déplace en amont et sa partie fine s'aplatit en aval (contrairement au cas précédent). Leurs explications font référence au passage de la forme Dome-shaped à la forme Bowl-shaped. La présence du régime Dome-shaped est caractérisé par une interaction entre la traînée et les forces de tensions superficielles. Tandis que pour le régime Bowl-shaped c'est une interaction entre les forces de traînée et les efforts visqueux. Le passage d'une forme à une autre se réalise donc lorsque les contraintes des efforts visqueux deviennent supérieures à celles des efforts de tensions superficielles.

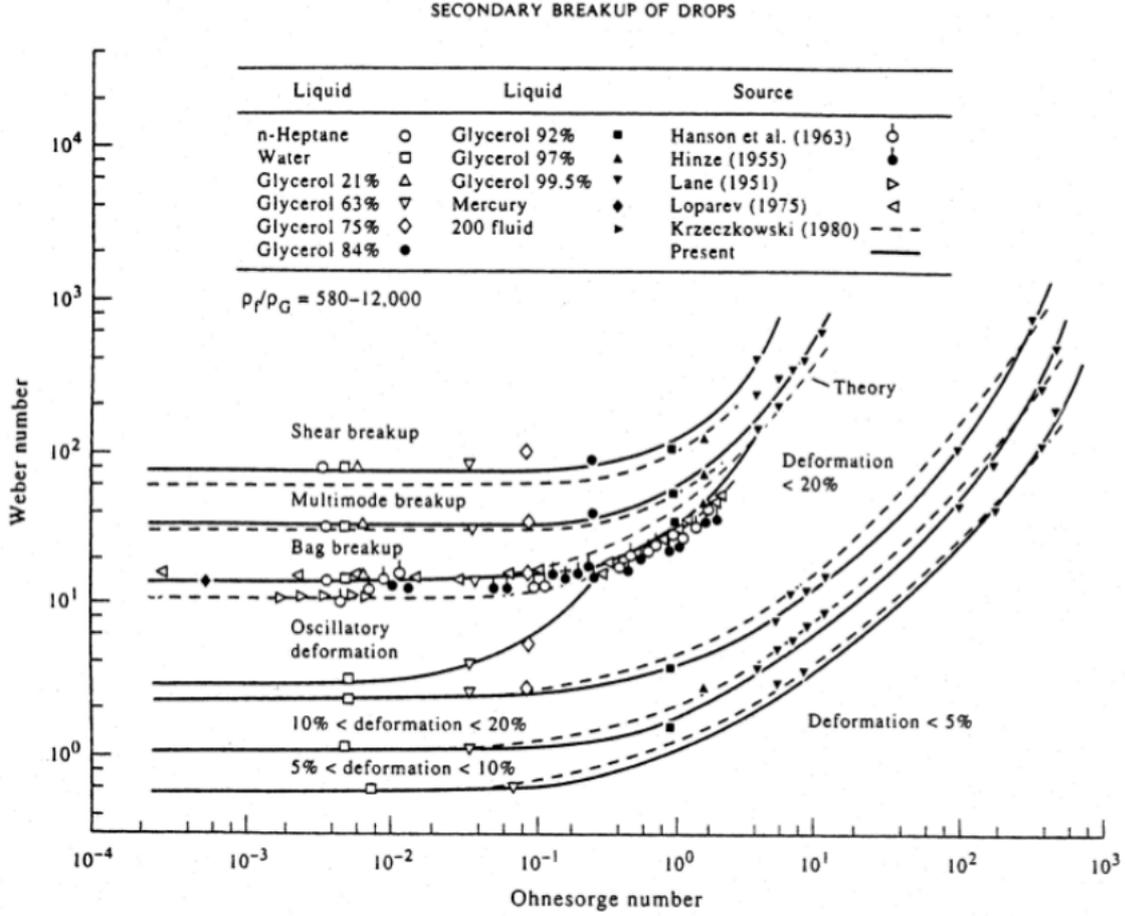


FIGURE 2.13. – Classification d'atomisation secondaire, Hsiang and Faeth [83].

2.2. Approche numérique et modélisations

2.2.1. Modélisation des équations de Navier-Stokes

La simulation numérique en mécanique des fluides consiste à étudier l'évolution spatiale et temporelle d'un fluide en résolvant numériquement les équations le régissant. Différents systèmes d'équations à résoudre existent en fonction des hypothèses initiales et des modélisations choisies (équations de Navier-Stokes, d'Euler, régime incompressible, stationnaire etc).

Sous les hypothèses d'écoulement monophasique, incompressible et isotherme, les équations de Navier-Stokes se simplifient en :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (2.19)$$

Ces deux équations correspondent respectivement à la conservation de la masse et à la conservation de la quantité de mouvement, (2.18) (2.19). La vitesse du fluide est notée u , la pression du fluide P , la viscosité dynamique du fluide μ et sa densité ρ .

Les hypothèses utilisées, monophasiques, incompressibles et iso-thermes, restreignent fortement le système d'équation. Dans d'autres configurations cela peut-être beaucoup plus complexe et posséder des équations supplémentaires, par exemple lors d'écoulements réactifs ou lors d'écoulement multi-fluides. En règle générale, la turbulence est présente dans tout type d'écoulement (exception de ceux laminaires) c'est pourquoi trois formalismes, manières, ont été utilisés pour la caractériser.

- Le formalisme DNS pour Direct Numerical Simulation, qui résout toutes les échelles de l'écoulement et qui est donc le plus précis.
- Le formalisme LES avec la simulation aux grandes échelles (Large Eddy Simulation), qui s'occupe de ne calculer que les plus grandes échelles de la turbulence et d'utiliser des modélisations pour les plus petites.
- Le formalisme RANS pour Reynolds Average Navier-Stokes qui résout les équations en se basant sur la décomposition en moyenne de Reynolds.

Une illustration des échelles résolues en fonction du formalisme est indiquée Figure 2.14 tandis qu'une application de chaque type de simulation est visible Figure 2.15 dans le cas de l'atomisation d'un jet rond.

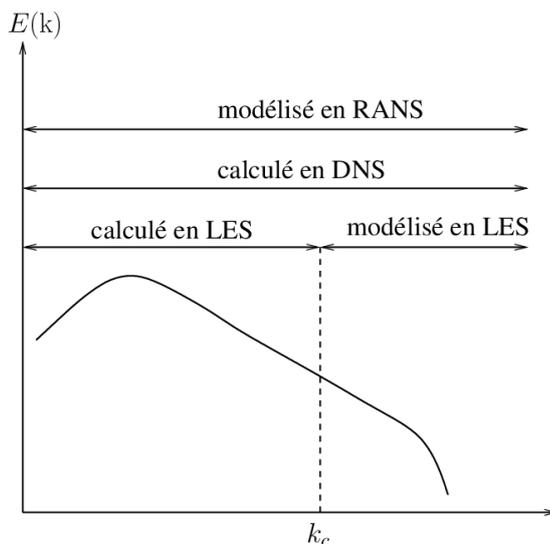


FIGURE 2.14. – Comparaison des spectres modélisés entre RANS, LES et DNS, Trontin [169].

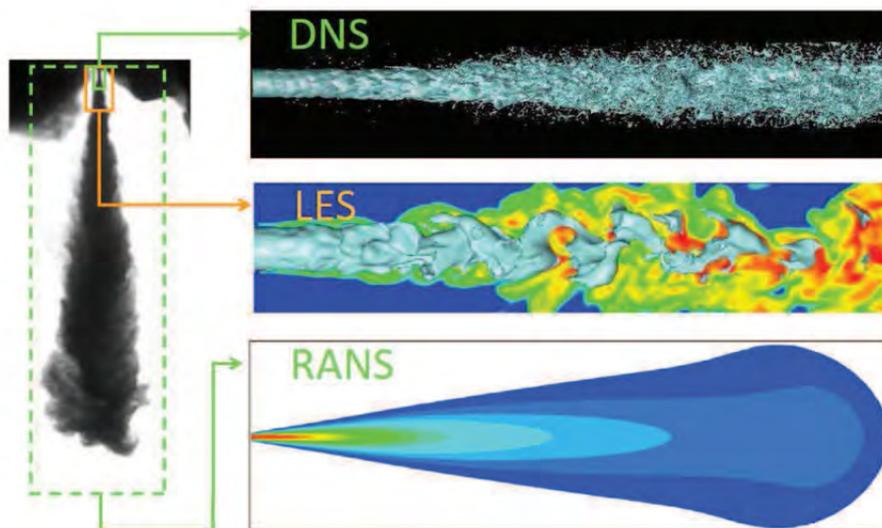


FIGURE 2.15. – Récapitulatif des différents formalismes utilisés pour la simulation et la modélisation de l'atomisation primaire. Représentation des échelles résolues par chaque formalisme. De haut en bas : DNS de Menard et al. [117], LES de Chesnel et al. [36] et simulation RANS de Lebas et al. [101] d'après Duret [54].

De plus, les modélisations RANS ou LES sont valables dans le cas général pour des écoulements monophasiques. Dans le cadre d'applications multiphasiques, ce type de modélisation ainsi que la recherche des termes associés reste question toujours ouverte.

2.2.1.1. Formalisme DNS

La simulation numérique directe (DNS) résout numériquement les équations instationnaires de Navier-Stokes sans aucun ajout de modèles sous-mailles. En effet, toutes les échelles spatiales et temporelles sont simulées. Dans le cas de la turbulence cela implique que la plus petite des échelles dissipatives, l_{diss} , comme l'échelle intégrale L caractéristique de l'écoulement, doivent être bien prises en compte. Cette contrainte implique un maillage extrêmement fin avec des coûts de calculs très importants. En effet, pour que l'échelle dissipative l_{diss} soit bien résolue, sa discrétisation doit être d'un nombre par un nombre de points np suffisant (communément compris entre 3 et 5). De plus, d'après l'analyse de Kolmogorov [92] :

$$L/l_{diss} \sim Re^{3/4} \quad (2.20)$$

Ce qui implique un nombre de points total en trois dimensions (np_{tot}) pour résoudre toutes les échelles de :

$$np_{tot} = \left(L \frac{np}{l_{diss}} \right)^3 \sim np^3 Re^{\frac{9}{4}} \quad (2.21)$$

Doubler le Reynolds implique de multiplier par $2^{\frac{9}{4}}$ (4.75) le nombre de points nécessaires. Autrement dit, une augmentation du Reynolds peut être rédhibitoire dans un calcul DNS puisque le nombre de points nécessaires, et le coût mémoire associée, explose rapidement (même pour des super-calculateurs). De plus, lorsque le Reynolds augmente, l'échelle dissipative, l_{diss} , diminue ce qui réduit le temps caractéristique de la turbulence et fait grossir le temps de calcul total. La prise en compte d'une deuxième phase rajoute d'ailleurs une échelle supplémentaire à prendre en compte, la taille de la plus petite topologie d'une phase. Toutefois, aucune échelle analogue n'est présente dans la théorie de Kolmogorov pour représenter cet effet.

Pour toutes ces raisons ce type de calcul s'effectue, dans la plupart des cas, sur des configurations réduites et simplifiées.

2.2.1.2. Formalisme LES

La simulation aux grandes échelles est un moyen de réduire la complexité de l'écoulement à simuler notamment grâce à son filtrage spatial, noté $(\bar{\cdot})$. Celui-ci consiste à définir une échelle de coupure, $\bar{\Delta}$, en-dessous de laquelle l'énergie due au mouvement tourbillonnaire doit être prise en compte avec un modèle dit sous-maille. Les mouvements les plus importants, les tourbillons les plus imposants sont résolus par la simulation tandis que les plus petits (en dessous de $\bar{\Delta}$) sont pris en compte au-travers d'une viscosité supplémentaire.

L'opération de filtrage est une convolution spatiale par un filtre G dont la taille caractéristique est proportionnelle à la taille de la maille, $\bar{\Delta}$. L'expression filtrée d'une variable quelconque f est donc :

$$\bar{f}(x, y, z) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} G(\bar{\Delta}, x - x', y - y', z - z') f(x', y', z') dx' dy' dz' \quad (2.22)$$

Cette opération est répétée aux équations de Navier-Stokes pour réduire leurs complexités. Dans le cadre d'étude 2.2.1, équations (2.18) et (2.19), cela donne :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial \rho R_{i,j}}{\partial x_j} \quad \text{avec} \quad \overline{u_i u_j} = R_{i,j} + \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (2.24)$$

Un terme sous maille apparaît, $R_{i,j}$, dans l'équation (2.23). Celui-ci est non-fermé et caractérise

les interactions entre les plus petites échelles et celles résolues. Ce terme doit être modélisé pour assurer la fermeture du système d'équation.

Le coût d'une simulation LES est bien moins important que celui d'une DNS grâce à ce filtrage spatial. En effet, celui-ci permet d'alléger le maillage nécessaire pour la simulation en utilisant des modèles pour les interactions avec les plus petites échelles non résolues. Toutefois, la fermeture de tels modèles sous-mailles se complexifient lorsque plusieurs phases sont présentes comme en diphasique.

2.2.1.3. Formalisme RANS

Ce formalisme se base sur une description statistique moyenne de l'écoulement. L'écoulement résolu est une moyenne d'ensemble d'une infinité d'écoulements semblables, noté $\overline{(\cdot)}$. La statistique de cette infinité de réalisation permet d'obtenir les variables statistiques moyenne de l'écoulement voulu. Pour une variable quelconque f , la moyenne associée \overline{f} est définie à partir de n réalisations :

$$\overline{f}(\vec{x}, t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \sum_{n=1}^n f^n(\vec{x}, t) \quad (2.25)$$

La décomposition de Reynolds utilisée pour résoudre les équations en RANS consiste à séparer une variable, f , en sa valeur moyenne, \overline{f} , et ses fluctuations, f' , suivant la notation $(\cdot)'$.

$$f = \overline{f} + f' \quad (2.26)$$

Dans le cas d'écoulement à masse volumique variable, la décomposition de Favre, $\widetilde{(\cdot)}$, s'inspirant de celle de Reynolds, $\overline{(\cdot)}$, est plus largement utilisée :

$$\widetilde{u}_i = \frac{\overline{\rho u_i}}{\overline{\rho}} \quad (2.27)$$

Ce type de décomposition permet d'obtenir les variables moyennées qui sont recherchées. Dans le cadre d'étude 2.2.1, équations (2.18) et (2.19), cela donne :

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \rho \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \overline{u}_i \overline{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial \rho R_{i,j}}{\partial x_j} \quad \text{avec} \quad R_{i,j} = \overline{u'_i u'_j} \quad (2.29)$$

Le tenseur de Reynolds, noté ici $R_{i,j}$, apparaît dans l'équation (2.29). Ce terme démontre que les valeurs moyennes ne sont pas suffisantes pour décrire complètement un écoulement turbulent. En effet, les mouvements turbulents aléatoires doivent être pris en compte pour déterminer $R_{i,j}$ et clore le système d'équation précédent.

La fermeture du tenseur de Reynolds est réalisée grâce à un modèle de turbulence qui utilise les grandeurs moyennes de l'écoulement. Le modèle diffère suivant les types d'écoulements simulés, sachant que l'un des plus utilisé est le modèle $k-\epsilon$ de Launder and Spalding [98] qui nécessite la résolution de deux équations supplémentaires.

Le formalisme RANS à l'avantage de réduire drastiquement le coût numérique par rapport à une DNS ou encore une LES. Ce formalisme moins coûteux permet de réaliser des applications plus complexes en termes de géométries mais aussi avec un nombre de Reynolds plus élevé. Par ailleurs, lorsque l'écoulement simulé est stationnaire, les calculs RANS permettent d'obtenir une solution convergée plus rapidement, ce qui est très recherché dans le milieu industriel. Néanmoins, ces modèles sont très spécifiques à cause de leurs modélisations complètes de la dynamique des échelles de la turbulence. La génération d'un modèle directement applicable à tous types d'écoulement n'est pas possible, c'est pourquoi certains paramètres doivent être ajuster en

fonction des particularités de l'écoulement. Ce paramétrage "nécessaire" est quelquefois la source de problèmes d'instabilités numériques ou de convergences puisqu'une forte interaction entre les différentes variables du problème existe.

2.3. Simulations numériques de l'atomisation assistée

L'étude de l'atomisation primaire est depuis longtemps le moteur de nombreux travaux numériques. Dans la littérature beaucoup de modèles et de codes de calcul permettant de simuler ce processus ont été publiés. Les plus précis n'utilisent pas de modèles physiques d'approximations pour représenter l'écoulement et sont classifiés dans la catégorie de simulations numériques directes, DNS. Tous les autres codes numériques, beaucoup plus rapides, utilisent des estimations plus ou moins complexes, des modèles pour représenter certains phénomènes et sont classifiés, par la suite, dans la catégorie dites phénoménologique.

2.3.1. Simulation numérique directe, DNS

Pour reproduire le plus fidèlement possible l'atomisation primaire, des codes de calculs extrêmement précis ont été mis au point. En effet, les simulations numériques directes doivent décrire explicitement l'interface liquide-gaz quelque soit l'échelle de l'atomisation. Le formalisme utilisé au sein de ce type de simulation est basé sur les équations de Navier-Stokes diphasiques incompressibles. De plus, une ou plusieurs équations supplémentaires sont nécessaires pour modéliser et décrire la géométrie de l'interface liquide-gaz. Tout ceci fait que ce type de simulation est souvent très coûteuse. D'ailleurs, le système d'équation à résoudre numériquement est souvent mal conditionné. En effet, de grandes discontinuités peuvent être présentes à l'interface lorsque les fluides simulés ont de grands rapports de densité ou de viscosité. De plus, la représentation de l'interface est un point capital en DNS car celle-ci possède une topologie complexe et doit pouvoir représenter toutes les échelles de l'atomisation.

Pour cette raison, différentes manières de représenter l'interface ont été réalisées, résumées en deux catégories.

2.3.1.1. Suivi d'interface

Cette méthode utilise des marqueurs Lagrangiens pour suivre l'interface, Daly [43], Tryggvason et al. [170], Figure 2.16. Les marqueurs sont reliés entre-eux par des segments de droite ou des polynômes de degré plus ou moins importants selon la finesse de description désirée. L'avantage indéniable de cette méthodologie est que la position de l'interface est instantanément connue avec une grande précision (indépendamment du maillage et de sa forme). Néanmoins, cette technique nécessite une redistribution régulière des marqueurs de l'interface. Sans oublier l'emploi d'algorithme complexe, coûteux et arbitraires pour gérer correctement les changements de topologies, surtout en 3D.

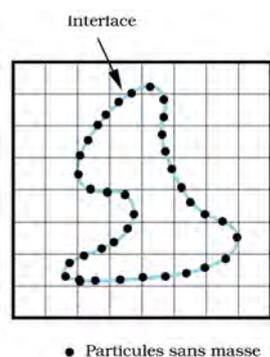


FIGURE 2.16. – Schématisation de la méthode des marqueurs de front, Couderc [39].

2.3.1.2. Capture d'interface

Cette méthode modélise une fonction indicatrice de phase par un champs scalaire advecté de façon eulérienne dans le domaine. L'interface est "capturée" à travers les variations de cette fonction, par exemple par une ligne d'iso-niveau. Historiquement, deux principales approches se sont développées et ont été largement utilisées dans la communauté scientifique.

Tout d'abord l'approche Volum Of Fluid (VOF), de Hirt and Nichols [80], qui transporte de manière conservative un scalaire représentant la fraction volumique de chaque fluide dans le domaine. La reconstruction d'interface exploite les propriétés d'incompressibilités du champ de vitesse, pour laquelle le volume est équivalent à la masse, pour définir une géométrie sous maille et donc empêcher la diffusion numérique de l'interface. Plusieurs algorithmes de reconstruction ont été mis au point pour augmenter la précision de ce calcul, Figure 2.17, tels que la reconstruction SLIC de Noh and Woodward [123], PLIC de Puckett and Saltzman [141], Kawano [89], Dai and Tong [42], LVIRA and ELVIRA de Puckett et al. [140], Pilliod and Puckett [136], Aulisa et al. [14].

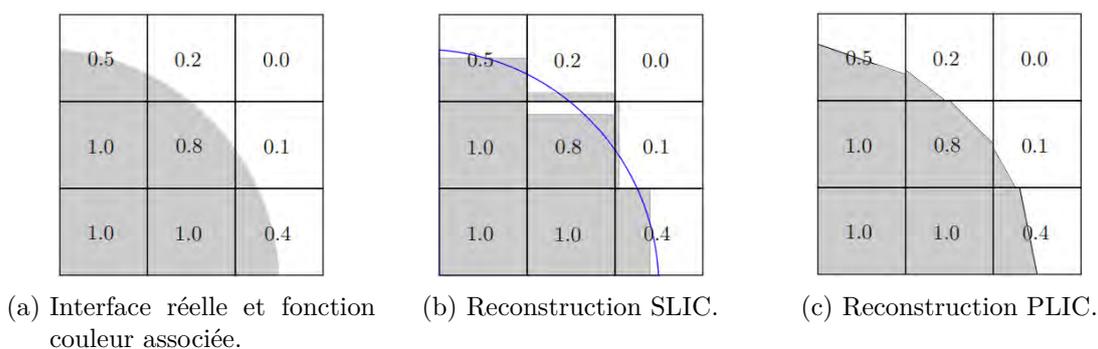


FIGURE 2.17. – Principe de la méthode VOF, Zuzio [184].

D'autre part, existe l'approche Level Set (LS) de Osher and R.Fedkiw [130] qui consiste à transporter la distance signée à l'interface dans le domaine, Figure 2.18. De cette manière, l'interface est directement identifiable par une isosurface du champs scalaire. Cette méthode permet de s'abstenir d'une étape de reconstruction. Cette méthode fournit une bonne description de l'interface, permet des calculs précis de normale et de courbure, tout en étant bien adaptée aux changements topologiques tels que la séparation ou la coalescence. Néanmoins, la fonction LS doit être hyper-régulière ce qui implique que des étapes de re-distanciation doivent être faites. De plus, cette fonction présente des inconvénients en terme de conservation massique.

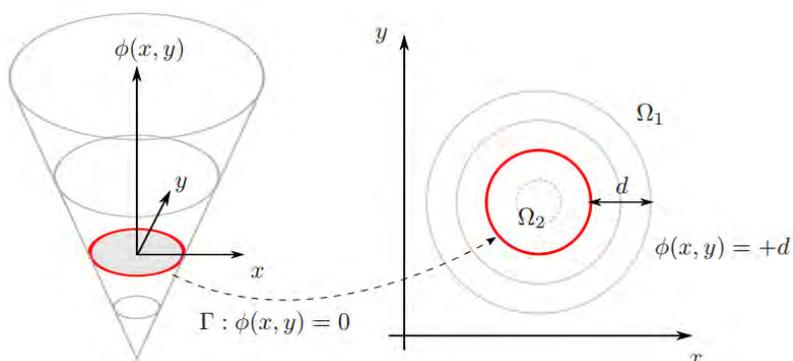


FIGURE 2.18. – Principe de la méthode LS, les courbes de niveaux de la fonction ϕ désignent l'ensemble des points distants de ϕ à l'interface, Zuzio [184].

C'est pour cette raison que des méthodes hybrides ont été développées, alliant l'avantage de la conservation massique du VOF avec la précision des propriétés interfaciales de la LS, noté

Coupled-Level-Set-Volum-Of-Fluid (CLSVOF) par Sussman and Puckett [166], Menard et al. [117].

2.3.1.3. Exemples d'applications

Une des toutes premières simulations numériques considérée comme une DNS fut réalisée par Bianchi et al. [23, 24]. Ces derniers simulèrent une injection de jet diesel dans un milieu au repos par une méthode purement VOF. Une de leurs constatations concerne la turbulence présente initialement dans l'injecteur qui influence la masse atomisée ainsi que la longueur de la colonne liquide. De plus, leur étude s'orienta vers les caractéristiques des gouttes et des ligaments produits. Toutefois, bien que considéré comme un calcul DNS leur résolution était trop grossière pour des analyses topologiques de gouttes ou de ligaments. Cette simulation fut considérée comme une des premières DNS en atomisation avec un maillage de $6.1 \cdot 10^6$ points, une résolution de $8 \mu\text{m}$ et 16 mailles dans le diamètre d'injection, Figure 2.19.



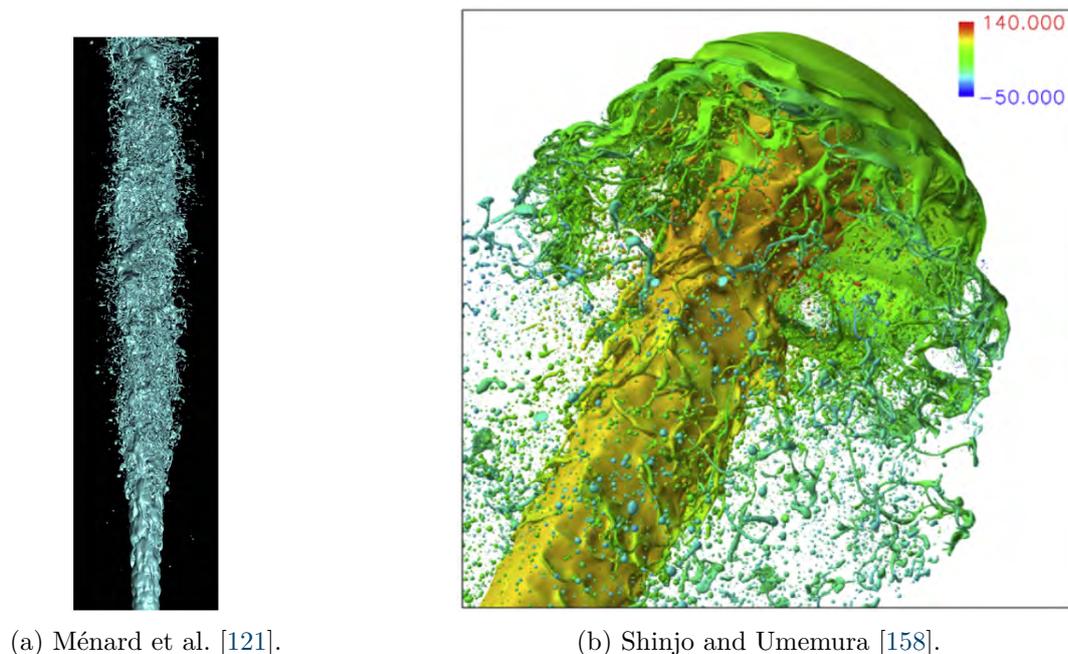
FIGURE 2.19. – Jet diesel en VOF, Bianchi et al. [23].

Beaucoup de travaux furent effectués sur cette configuration de jet diesel par les équipes du laboratoire CORIA avec Ménard et al. [121], Menard et al. [117], Lebas et al. [101] ainsi que Chesnel et al. [36]. En effet, Ménard et al. [121] ont développé une nouvelle méthode CLSVOF avec un traitement spécifique des conditions de saut par la méthode Ghost-Fluid de Fedkiw et al. [57], Figure 2.20a. Grâce à cette dernière, une reproduction, au moins qualitative, de la désintégration d'un jet liquide est possible à de fines résolutions, d'après les travaux de Menard et al. [117]. Leur domaine numérique comportait $14.6 \cdot 10^6$ points avec une résolution de $2.36 \mu\text{m}$ et 42 mailles dans le diamètre d'injection, ce qui est déjà plus du double de Bianchi et al. [23] en l'espace d'un an. Néanmoins, malgré cette fine résolution la taille des plus petites structures reste dépendante du maillage comme l'ont souligné Gorokhovski and Herrmann [66].

En parallèle Desjardins et al. [48] ont développé une nouvelle méthode basée sur une expression de la LS conservative, Accurate Conservative Level Set (ACLS). À l'aide de cette nouvelle méthode, Desjardins et al. [48] effectuèrent eux-aussi une simulation de jet Diesel ($16.7 \cdot 10^6$ points et 42 mailles dans le diamètre d'injection) mais pour des rapports de densité et de viscosité plus éloignés de l'expérience.

Enfin les travaux de Shinjo and Umemura [158] sur le jet Diesel en CLSVOF restent à ce jour une des références en terme de précision dans la domaine de la simulation numérique d'atomisation. En effet, les maillages utilisés contenaient entre $400 \cdot 10^6$ à $6 \cdot 10^9$ points pour une résolution minimale de $0.75 \mu\text{m}$ et 66 mailles dans le diamètre d'injection, Figure 2.20b.

Au-travers de telles simulations Shinjo and Umemura [158] ont démontré l'efficacité de leur outil numérique et établit une base de données d'une finesse jusqu'ici inaccessible. Des observations très locales illustrant la formations de gouttes et de ligaments ont pu être réalisées en les reliant à des calculs de We . De plus, le suivi des instabilités surfaciques a permis de mieux comprendre leurs développements. Celles-ci naissent à la tête du "champignons" liquide par l'impact à haute vitesse



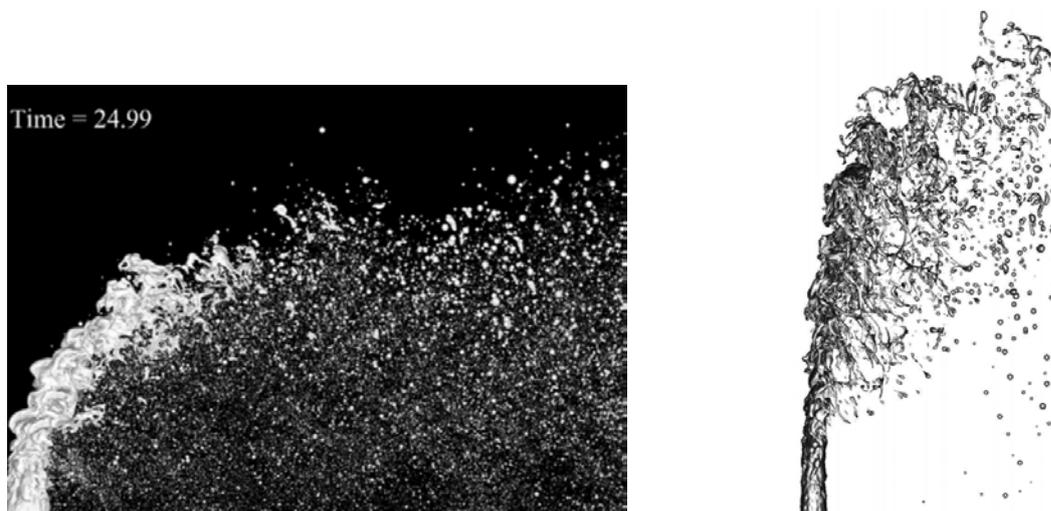
(a) Ménéard et al. [121].

(b) Shinjo and Umemura [158].

FIGURE 2.20. – DNS de jet Diesel en CLSVOF.

de la colonne dans le milieu ambiant au repos. Finalement, grâce à cette précision numérique, l'atomisation secondaire de structures détachées a pu être observée.

L'injection de jets ronds dans un milieu cisailant fut une autre configuration largement étudiée par la communauté scientifique. En effet, Herrmann [76, 77] s'intéresse à l'atomisation d'un jet liquide turbulent avec la méthode Refined Level Set Grid (RLSG). Cette dernière utilise un premier maillage très raffiné pour transporter l'interface avec une méthode LS puis un second maillage, plus grossier, pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Herrmann observa la formation de ligaments et de gouttes avec une résolution allant jusqu'à un centième du diamètre de l'injecteur (de l'ordre de $10\ \mu\text{m}$), Figure 2.21a. De plus, les structures identifiées comme des gouttes sphériques sont injectées dans un solveur Lagrangien pour le suivi de particules et l'atomisation secondaire. Grâce à cette fine résolution, Herrmann retrouve les instabilités de surface générées par le cisaillement de l'écoulement gazeux, comme l'a observé expérimentalement Sallam et al. [152].



(a) Herrmann [76].

(b) Pai et al. [131].

FIGURE 2.21. – DNS de jet cisailé.

Par ailleurs, Pai et al. [131] étudièrent aussi cette configuration de jet liquide cisailé avec la méthode Spectrally Refined Interface (SRI), Figure 2.21b. Cette dernière consiste sommairement à reconstruire la LS sous-maille grâce à des polynômes. Pai et al. [131] firent une première étude paramétrique pour isoler les effets de l'écoulement sur la trajectoire du jet et sur les instabilités se développant à sa surface. Leurs mesures de longueurs d'ondes des instabilités se développant sur la surface du jet à même nombre de Weber liquide et Weber gazeux variable fut en contradiction avec les observations de Sallam et al. [152]. Cependant, en faisant une analyse plus poussée des expériences de Sallam et al. [152] le nombre de Weber liquide n'avait pas pu être gardé constant, ce qui invalidait la comparaison numérique et la première contradiction. Finalement, leurs conclusions de cette étude concerne la longueur d'onde qui diminue lorsque le nombre de Weber liquide augmente. L'ordre de grandeur des maillages utilisés était du million, 36 à $110 \cdot 10^6$, avec dans le cas le plus fin une résolution de $12 \mu\text{m}$ et 40 mailles dans le diamètre, Figure 2.21.

Enfin, l'ONERA avec Zuzio et al. [186] développa une nouvelle méthode appelée Consistent Mass Momentum (CMOM) dans le solveur DYJEAT pour simuler le comportement d'un jet cisailé à haut rapport de densité (10^3), Figure 2.22. Le comportement du jet est en accord avec les résultats expérimentaux de Bodoc et al. [27] et Desclaux et al. [47]. Le domaine de la simulation comportait $268.4 \cdot 10^6$ mailles avec une résolution de $40 \mu\text{m}$ et 50 points dans le diamètre.

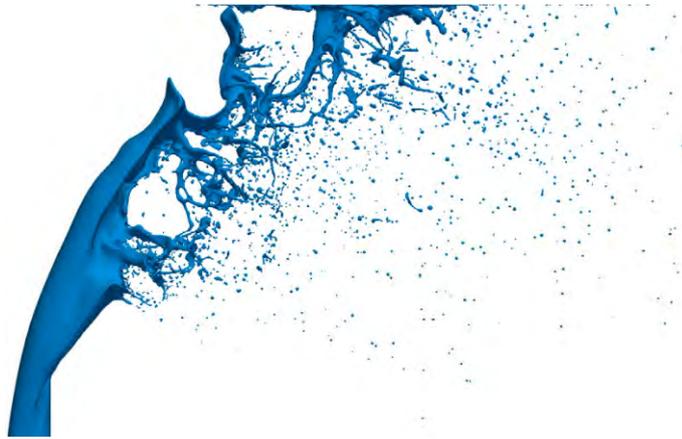
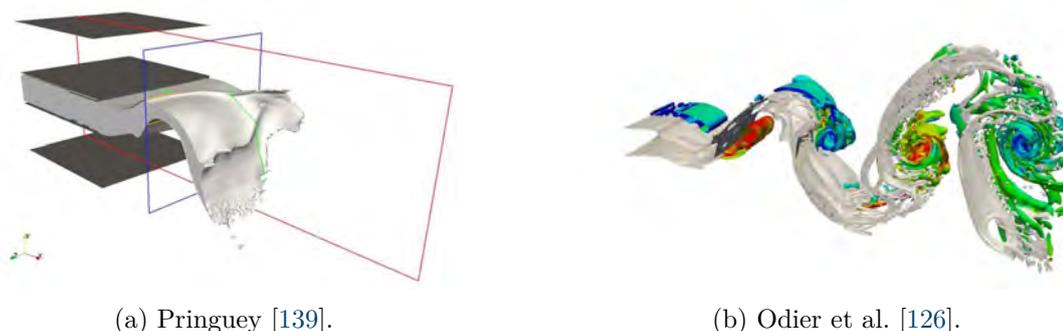


FIGURE 2.22. – DNS de jet cisailé par Zuzio et al. [186].

En comparaison, peu de travaux existent sur l'atomisation assistée de nappes liquides, car la simulations de ces dernières possèdent une difficulté supplémentaire, leurs oscillations. En effet, ces nappes dispersent le liquide généré au sein d'un vaste volume et ainsi pénalisent les résolutions maximales raisonnablement atteignables. Parmi les travaux existants, Raessi and Pitsch [143] ont développé une méthode numérique conservative de la Level-Set (CLS). La capture de l'interface est réalisée avec un schéma consistant pour le transport de la masse et de la quantité de mouvement. Leurs travaux sur l'atomisation bidimensionnelle de nappes liquides étaient effectués dans des conditions réalistes d'injection avec des rapport de densité proche d'expériences. L'interaction entre la nappe liquide et le courant d'air mène à une oscillation sinusoïdale de la nappe, conformément aux observations expérimentales de Stapper and Samuelsen [164] et plus récemment de Park et al. [132]. Cette nouvelle méthode numérique a été testée sur différents cas test allant jusqu'à des rapports de densité de 10^6 .

Ensuite, Pringuey [139] a développé un nouveau solveur lesRCLSFoam dans OpenFOAM basé sur des méthodes numériques mieux adaptées à la simulation de nappes liquides cisailées, Figure 2.23a. Celui-ci utilise une méthode ACLS de Desjardins et al. [48] avec un schéma WENO d'ordre élevé pour le suivi d'interface. Les résultats d'atomisations de nappes liquides cisailées ont été qualitativement validés sur les prédictions d'analyse de stabilité théorique de Cousin and Dumouchel [40] et les corrélations de longueur de rupture issues des expériences de Fernández et al. [59].

Odier et al. [126] utilisèrent le code YALES2 non-structuré, massivement parallèle et possédant des schémas d'ordre élevé en temps et en espace sur cette configuration de nappe liquide



(a) Pringuey [139].

(b) Odier et al. [126].

FIGURE 2.23. – DNS de nappe liquide cisillée.

cisillée Figure 2.23b. Le suivi d'interface a été réalisé par la méthode ACLS et les conditions de saut par la méthode Ghost-Fluid, Fedkiw et al. [57]. Leurs études s'effectuèrent sur un point de fonctionnement relativement éloigné des conditions expérimentales, notamment pour un rapport de densité de 10. Cela leur a permis de faire une étude de sensibilité pour un coût de calcul moins important. Le comportement de cette nappe fut caractérisé grâce à des moyennes portant sur la longueur de rupture, la longueur d'oscillation ainsi que son taux d'amplification. Odier et al. [126] isolèrent deux types de fréquences, celles liées aux instabilités interfaciales et donc à l'atomisation primaire, puis celles liées à l'oscillation globale de la nappe. De plus, Odier et al. [126] constatèrent que la vitesse convective des instabilités liées à l'atomisation primaire a une valeur proche de celle théorique de Dimotakis [49] à contrario de celle de l'ensemble de la nappe liquide qui est deux fois plus élevée. Leur domaine numérique contenait $56 \cdot 10^6$ mailles, avec une résolution minimale de $20 \mu\text{m}$ et 50 points initialement dans la nappe.

De son côté l'ONERA possède un code de calcul interne, DYJEAT, pour la simulation numérique directe. Ce dernier, créé par Couderc [39] utilise initialement une méthode LS pour la description de l'interface. D'autre part, une version de DYJEAT utilisant l'AMR fut développée par Zuzio [184] et utilise la librairie PARAMESH pour raffiner le maillage au niveau de l'interface tout en étant couplé avec une méthode CLSVOF, Sarthou et al. [154], Zuzio et al. [185]. Cette version fut créé dans le but de capter toutes les échelles de l'atomisation d'une nappe liquide cisillée à rapport de densité 100. Finalement, le code DYJEAT fut mis-à-jour pour utiliser un couplage LS VOF pour le transport de la masse et du moment, Zuzio et al. [186]. Ce code de calcul résout les équations de Navier-Stokes incompressibles sur des maillages cartésiens structurés. Sa robustesse s'illustre au-travers des ses multiples configurations d'emploi allant de l'impact de gouttes surfondues (SLD) Xavier et al. [181], Xavier [180] au jet liquide cisillé précédemment cités, Zuzio et al. [186], puis sur la configuration de nappe liquide cisillée, Averseng et al. [15].

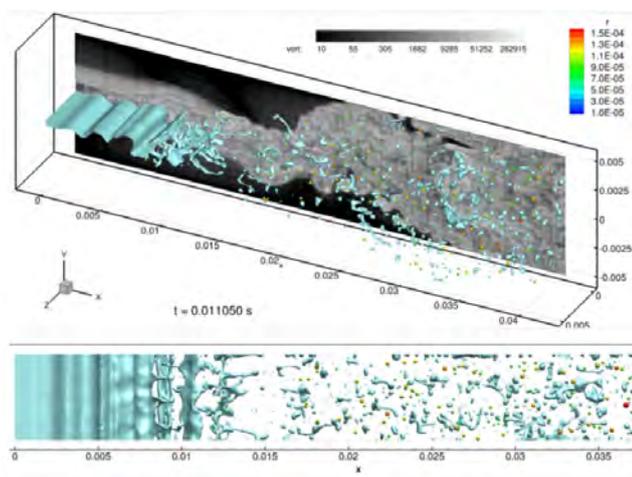


FIGURE 2.24. – DNS de nappe liquide cisillée par Zuzio [184].

Grâce aux versions de DYJEAT, des études paramétriques ont pu être menées notamment sur l'influence des conditions d'injections sur l'atomisation primaire d'une nappe liquide cisillée en 2D. Ces simulations ont pu démontrer qu'une augmentation de la vitesse du gaz initiale permet d'augmenter la fréquence de battement de la nappe. Plus récemment, des simulations 3D ont été effectuées par Sarthou et al. [154], sur une géométrie simplifiée similaire à une configuration expérimentale étudiée à l'ONERA, Dejean [45], Fernández [58].

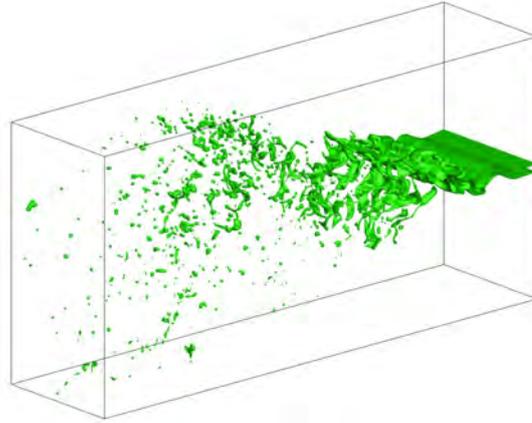


FIGURE 2.25. – DNS d'une nappe liquide cisillée par Sarthou et al. [154].

L'interface de la nappe est bien résolue, des instabilités longitudinales et transversales s'y sont développées menant à la formation de ligaments puis de gouttes, Figure 2.25. Tous les phénomènes conduisant l'atomisation sont bien reproduits numériquement. Néanmoins, les comparaisons quantitatives entre les résultats numériques et expérimentaux illustrent que la simulation numérique a tendance à surestimer la fréquence de battement et sous-estimer la longueur de rupture de la nappe.

Plus récemment, les développements au sein du code de recherche SLOSH par Blanchard [25] ont permis d'atteindre des résolutions équivalentes à des DNS pour la simulation d'atomisation assistée de nappe liquide. Bien que SLOSH se base sur un solveur compressible à interface diffuse pour maillage non-structuré, l'approche hybride développée par Blanchard [25] a permis de réaliser ce type de simulation, Figure 2.26. En effet, la zone proche de l'injection est décrite par un formalisme Eulérien multi-fluide tandis dans le reste du domaine, où la phase liquide est diluée, est décrite tel un écoulement à phase dispersée en Eulérien ou en Lagrangien.

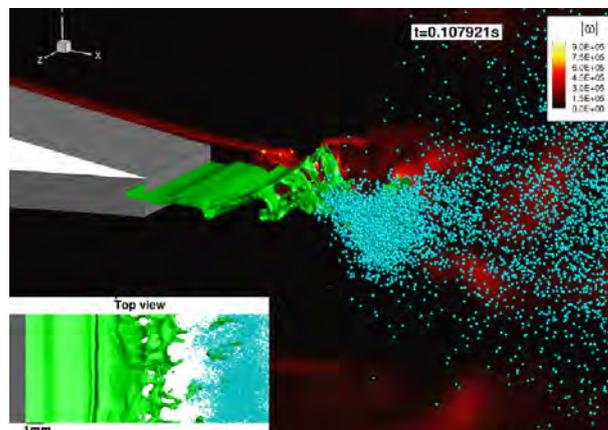


FIGURE 2.26. – Simulation d'une nappe liquide cisillée par Blanchard [25].

Cette approche hybride a été implémentée dans la plateforme CEDRE de l'ONERA ainsi que les récents travaux de Cordesse [38] pour mieux représenter l'atomisation primaire.

2.3.2. Approches phénoménologiques

Les approches phénoménologiques ont permis de reproduire des phénomènes complexes d'atomisation grâce à des observations et des modèles finement construits. Ces approches utilisent des maillages beaucoup plus légers, relativement aux DNS, et sont donc prometteurs pour des simulations visant des applications industrielles. Deux types d'approches sont brièvement illustrées ci-dessous, celles considérées comme stochastiques puis l'approche multi-échelle d'ELSA.

2.3.2.1. Approches stochastiques

Les approches stochastiques ont souvent été utilisées pour décrire le processus d'atomisation secondaire, Apte et al. [13], et plus récemment dans le cadre de l'atomisation primaire, Gorokhovski et al. [67]. En effet, le processus d'atomisation peut être considéré comme une cascade de fragmentations lorsque l'hypothèse de symétrie d'échelle, Gorokhovski and Saveliev [68], est vérifiée. Cette condition est vérifiée lorsque les nombres de Reynolds et Weber gazeux ainsi que la fréquence de fragmentation sont grands.

Dans ce cas précis l'atomisation est assimilable à une succession de fragmentations, modélisée, qui permet d'étudier le développement du spray de l'atomisation primaire jusqu'à la distribution finale de gouttes. L'atomisation primaire est vue comme un condition d'injection de gouttes et ces dernières sont suivies de manière lagrangienne.

2.3.2.1.1. Corrélation d'Elkottb

Elkottb [56], propose d'établir un diamètre de goutte représentatif d'une injection de type diesel. Un nouveau paramètre est défini, le diamètre moyen de Sauter d_{32} , qui représente le diamètre d'une goutte qui à le même rapport volume/surface que la totalité du spray.

$$d_{32} = \frac{\sum_{i=1}^N n_i d_i^3}{\sum_{i=1}^N n_i d_i^2} \quad (2.30)$$

Elkottb [56] propose la corrélation suivante pour estimer le d_{32} .

$$d_{32} = 6156\nu_l^{0.385} (\sigma\rho_l)^{0.737} \rho_g^{0.006} \Delta P^{-0.54} \quad (2.31)$$

Avec ΔP , la différence de pression entre le réservoir de l'injecteur (de type pressure-swirl) et le milieu au repos.

2.3.2.1.2. Corrélation d'Hiroyasu

Hiroyasu et al. [79] ont proposé une corrélation du diamètre de Sauter à partir de leurs mesures expérimentales et des nombres sans dimensions associés. Cette corrélation se base sur un injecteur diesel mis en pression et leur mesure en temps réel du spray utilise un système de mesure optique basé sur la diffraction de Fraunhofer.

$$d_{32} = \max \left\{ \begin{array}{l} 4.12 Re_l^{0.12} We_l^{-0.75} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{0.52} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0.18} d_{inj} \\ 0.38 Re_l^{0.25} We_l^{-0.32} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{0.37} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{-0.57} d_{inj} \end{array} \right. \quad (2.32)$$

2.3.2.1.3. Modèle Taylor Analogy Breakup

O'Rourke and Amsden [128] ont proposé le modèle Taylor Analogy Breakup (TAB) pour représenter l'atomisation d'une goutte. Ce dernier fait une analogie entre l'atomisation d'une goutte et un système masse ressort. Pour cela, la force extérieure est associée avec la force aérodynamique, la force de rappel avec la tension de surface et la force d'amortissement avec la force visqueuse. Le modèle s'inspire donc de l'équation régissant le mouvement d'un oscillateur forcé :

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{F}{m} - \frac{kr}{m}x - \frac{ft}{m} \frac{dx}{dt} \quad (2.33)$$

Avec F la force extérieure, m la masse, kr la raideur du ressort et ft le frottement. Le déplacement de l'équateur de la goutte est notée x . Cette grandeur est adimensionnée, y_{init} , par le rayon de la goutte initial r_{init} .

$$y_{init} = \frac{x}{C_b r_{init}} \quad (2.34)$$

Grâce à cette dernière, l'équation du mouvement devient :

$$\frac{d^2y}{dt^2} = \frac{C_f \rho_g U_{rel}^2}{C_b \rho_l r_{init}^2} - \frac{C_k \sigma}{\rho_l r_{init}^3} y - \frac{C_d \mu_l}{\rho_l r_{init}^2} \frac{dy}{dt} \quad (2.35)$$

En supposant que la vitesse relative, U_{rel} , est constante, la solution exacte de l'équation (2.35) est donnée par :

$$y(t) = \frac{C_f}{C_b C_k} W_{e_{rel}} + \exp\left(-\frac{t}{t_d}\right) \left[\left(y_{init} - \frac{C_f}{C_b C_k} W_{e_{rel}} \right) \cos(\omega t) + \frac{1}{\omega} \left(\frac{dy_{init}}{dt} + \frac{y_{init} - \frac{C_f}{C_b C_k} W_{e_{rel}}}{t_d} \right) \sin(\omega t) \right] \quad (2.36)$$

Ici ω désigne la pulsation propre du système, C_f , C_k , C_b , C_d des constantes.

$$W_{e_{rel}} = \frac{\rho_g U_{rel}^2 r_{init}}{\sigma}; \quad y_{init} = y(0); \quad \frac{1}{t_d} = \frac{C_d}{2} \frac{\mu_l}{\rho_l r_{init}^2}; \quad \omega = \sqrt{C_k \frac{\sigma}{\rho_l r_{init}^3} - \frac{1}{t_d^2}} \quad (2.37)$$

$$C_f = \frac{1}{3}; \quad C_k = 8; \quad C_b = \frac{1}{2}; \quad C_d = 10 \quad (2.38)$$

Dans l'hypothèse d'un liquide non visqueux ($t_d \rightarrow \infty$) et si $y_{init} = \frac{dy_{init}}{dt} = 0$ alors l'équation (2.36) se simplifie en :

$$y(t) = \frac{C_f}{C_b C_k} W_{e_{rel}} (1 - \cos(\omega t)) \quad (2.39)$$

La cassure de la goutte est modélisée par un déplacement adimensionnel lorsque $y(t) > 1$. Cela représente un déplacement de l'équateur de la goutte supérieur à $r_{init}/2$. Cette condition implique que le Weber critique, W_{e_c} , calculé à partir du rayon de la goutte, ne peut pas dépasser un certain seuil :

$$1 = \frac{C_f}{C_b C_k} 2W_{e_c} \quad W_{e_c} = \frac{C_b C_k}{2C_f} = 6 \quad (2.40)$$

Le modèle TAB prévoit deux temps de rupture, τ_{rup} . Le premier pour le régime "bag break-up" lorsque le Weber est proche du Weber critique.

$$\tau_{rup} = \pi \sqrt{\frac{\rho_l r_{init}^3}{8\sigma}} \quad (2.41)$$

Le second pour un régime plus intense, $We_c \gg 1$, qui correspond à un régime "stripping break-up".

$$\tau_{rup} = \frac{r_{init}}{U_{rel}} \sqrt{\frac{3\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.42)$$

Une des spécificités de ce modèle est l'absence d'estimation de l'angle du brouillard des gouttes émises car leur injection est purement axiale.

2.3.2.1.4. Modèle WAVE

Le modèle le plus connu pour prendre en compte les gouttes issues de l'atomisation primaire pour des jets ronds non cisailés dans l'industrie est le modèle WAVE, originellement développé par Reitz and Diwakar [149]. Celui-ci se base sur le développement des instabilités de type Kelvin-Helmholtz dans une configuration d'injecteur à jets ronds cylindriques. Initialement, Reitz and Diwakar [149] propose que l'atomisation primaire, ainsi que les gouttes générées, soient le produit des instabilités de surface de type Kelvin-Helmholtz.

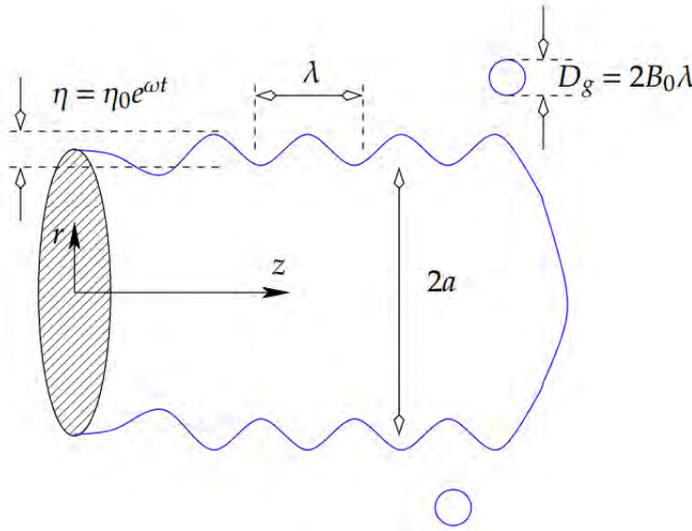


FIGURE 2.27. – Colonne liquide et instabilité de surface de Kelvin-Helmholtz d'après le modèle WAVE de Reitz and Diwakar [149].

Le modèle WAVE cherche à obtenir le diamètre final des gouttes émises ainsi que leurs vitesses lors de l'atomisation primaire en fonction de la longueur d'onde la plus instable, ici λ_{k-h} , et de sa fréquence, ω_{k-h} . Le postulat de base est qu'un amas liquide, ici la colonne d'un jet rond (ou "blobs"), se fragmente sous l'action de l'instabilité de Kelvin-Helmholtzen une multitude de gouttes de même diamètre. L'amas liquide initial est associé à une goutte mère, de rayon $r_{mère}$, qui, en se fragmentant, donne naissance aux gouttes filles, de rayon r_{fille} . Grâce à une analyse linéaire, Reitz, détermine la longueur d'onde, λ_{k-h} , ainsi que la fréquence associée au taux d'accroissement prépondérant, ω_{k-h} , en fonction des nombres adimensionnels de l'écoulement et du rayon de la goutte mère.

$$\lambda_{k-h} = 9.02r_{mère} \frac{(1 + 0.45\sqrt{Oh}) (1 + 0.4 (Oh\sqrt{We_g})^{0.7})}{(1 + 0.865We_g^{1.67})^{0.6}} \quad (2.43)$$

$$\omega_{k-h} = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l (\frac{d_{inj}}{2})^3}} \frac{0.34 + 0.385We_l^{1.5}}{(1 + Oh) (1 + 1.4 (Oh\sqrt{We_g})^{0.6})} \quad (2.44)$$

Ici le diamètre de l'injecteur est noté, $d_{inj} = 2a$. Grâce à cela le rayon des gouttes filles, r_{fille} ,

est :

$$r_{\text{fille}} = \begin{cases} B_0 \lambda_{k-h} & \text{si } B_0 \lambda_{k-h} \leq \frac{d_{inj}}{2} \\ \min \left[\left(\frac{3\pi \left(\frac{d_{inj}}{2}\right)^2 U_{rel}}{2\omega_{k-h}} \right)^{\frac{1}{3}} ; \left(\frac{3\pi \left(\frac{d_{inj}}{2}\right)^2 \omega_{k-h}}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \right] & \text{si } B_0 \lambda_{k-h} > \frac{d_{inj}}{2} \end{cases} \quad (2.45)$$

Avec $B_0 = 0.61$ une constante de modélisation. Dans cette modélisation, la fragmentation de la goutte mère en gouttes filles suit la loi d'évolution temporelle suivante :

$$\frac{dr_{\text{mère}}}{dt} = -\frac{r_{\text{mère}} - r_{\text{fille}}}{\tau_{rup}} \quad \text{avec } r_{\text{mère}}(t = t_{init}) = \frac{d_{inj}}{2} \quad (2.46)$$

Ainsi, la goutte mère subit une fragmentation complète au bout du temps caractéristique τ_{rup} . Ce dernier est obtenu à partir de la relation suivante :

$$t_{rup} = 3.726 B_1 \frac{r_{\text{mère}}}{\lambda_{k-h} \omega_{k-h}} \quad (2.47)$$

Ici $B_1 \approx 10$ est une constante de modélisation en fonction de la géométrie de l'injecteur. L'avantage de cette modélisation concerne l'estimation des vitesses initiales longitudinales et radiales, u_{init} et v_{init} , des gouttes filles ainsi que l'angle de spray généré θ_{spray} .

$$u_{init} = C_D \sqrt{\frac{2\Delta P}{\rho_l}} \quad v_{init} = u_{init} \tan\left(\frac{\theta_{spray}}{2}\right) \quad \tan\left(\frac{\theta_{spray}}{2}\right) = A_1 \lambda_{k-h} \frac{\omega_{k-h}}{u_{init}} \quad (2.48)$$

ΔP représente la différence de pression entre le réservoir et la chambre de combustion, C_D un coefficient de décharge propre à l'injecteur et A_1 une constante de modélisation fonction de la géométrie de l'injecteur.

Plus récemment, Patterson and Reitz [133] ont proposé de prendre en compte l'instabilité de Rayleigh-Taylor présente sur la colonne liquide. En effet, connaître l'instabilité qui donne naissance à l'onde ayant le plus grand taux d'accroissement est primordial puisque cette dernière est sélectionnée pour modéliser la fragmentation de la goutte mère. Patterson et Reitz ré-utilisent la précédente méthodologie pour obtenir la longueur d'onde de l'instabilité de Rayleigh-Taylor λ_{r-t} ainsi que la fréquence la plus instable, possédant le plus grand taux d'accroissement ω_{r-t} .

D'après le modèle de Chang [33], l'accélération de la goutte générée est :

$$a = \frac{3}{8} C_D \frac{\rho_g U_{rel}^2}{\rho_l r_{fille}} \quad (2.49)$$

Ici, le coefficient de traînée est noté, C_D . Le calcul de la longueur d'onde devient donc :

$$\lambda_{r-t} = 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{a\rho_l}} = \frac{4\pi}{U_{rel}} \sqrt{\frac{2\sigma r_{fille}}{C_D \rho_g}} \quad (2.50)$$

Avec la fréquence instable ω_{r-t} :

$$\omega_{r-t} = \sqrt{\frac{2a}{3} \sqrt{\frac{a\rho_l}{3\sigma}}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{C_D \rho_g U_{rel}^2}{2r_{fille} \rho_l} \sqrt{\frac{C_D \rho_g U_{rel}^2}{2r_{fille} \sigma}}} \quad (2.51)$$

Pour finir, le temps de rupture associé devient :

$$t_{rup} = \sqrt{\frac{8\rho_l}{C_D \rho_g} \sqrt{\frac{2}{C_D W e_l}}} \quad (2.52)$$

2.3.2.1.5. Simulations avec modèles stochastiques

Gorokhovski and Saveliev [68] furent parmi les premiers à utiliser un formalisme stochastique pour représenter les structures liquides dans une simulation. Leur approche suppose une fréquence de fragmentation du cœur liquide ainsi que des Weber et Reynolds gazeux très élevés pour considérer le jet soumis à une rupture en cascade. Cet ensemble de considération se rapproche de celle utilisée par Kolmogorov [92] pour la turbulence. Leurs travaux consistent à introduit des parcelles stochastiques dans le domaine gazeux suivi d'une approche lagrangienne, Figure 2.28. En effet, pour être le plus représentatifs possibles, ces modèles sont habituellement couplés à un calcul RANS ou LES de l'écoulement gazeux avec des ajustements de constantes en fonction de la configuration étudiée. Comme toutes modélisations, cette dernière à des limites. Dans cette dernière c'est l'absence de représentation de l'atomisation primaire au-travers de la formation et destruction de structures ligamentaires.

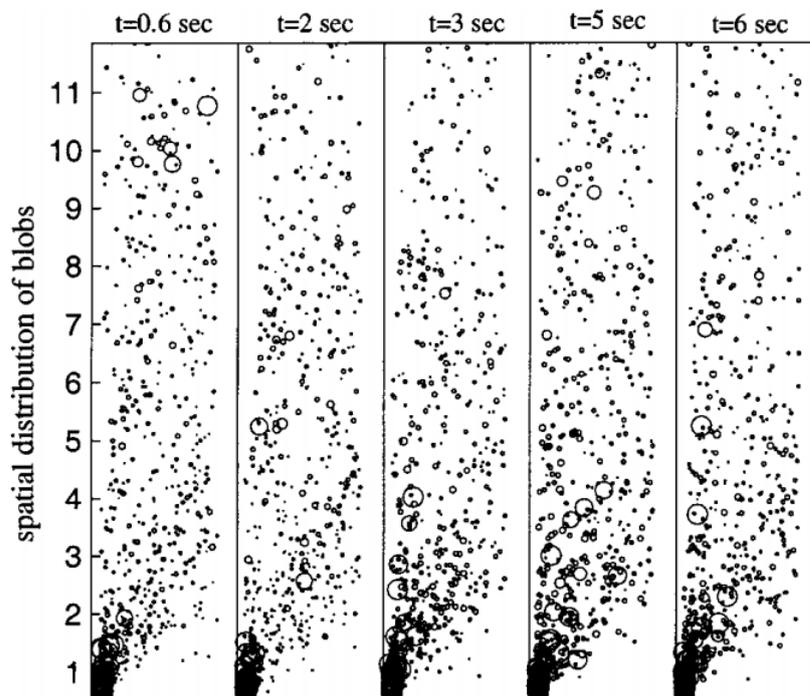


FIGURE 2.28. – Distributions spatiale des gouttes calculées pour différents instants dans le spray d'eau atomisé par le jet d'air coaxial, Gorokhovski and Saveliev [68].

Jouanguy [87] a lui aussi utilisé une approche stochastique pour simuler le spray généré par un jet liquide cisailé dans un courant gazeux, Figure 2.29. Des distributions de gouttes sont introduites dans le domaine de simulation (proche de l'injecteur) à partir d'une estimation statistique de la probabilité de présence du cœur liquide. Ces inclusions de gouttes conservent le débit d'injection liquide et sont soumises à l'atomisation secondaire, coalescence et séparation, également par processus stochastique. Pour cela, les effets aérodynamiques sont pris en compte par couplage entre les gouttes et la phase gazeuse résolue en LES. Les résultats de Jouanguy [87] démontrent que le comportement qualitatif de l'atomisation est bien reproduit, au-travers de la diminution de la longueur du cœur liquide et de la taille des gouttes lorsque le rapport de quantité de mouvement augmente. Néanmoins, cette approche ne permet pas de reproduire les phénomènes se déroulant lors de l'atomisation primaire, fragmentation ligamentaire etc.

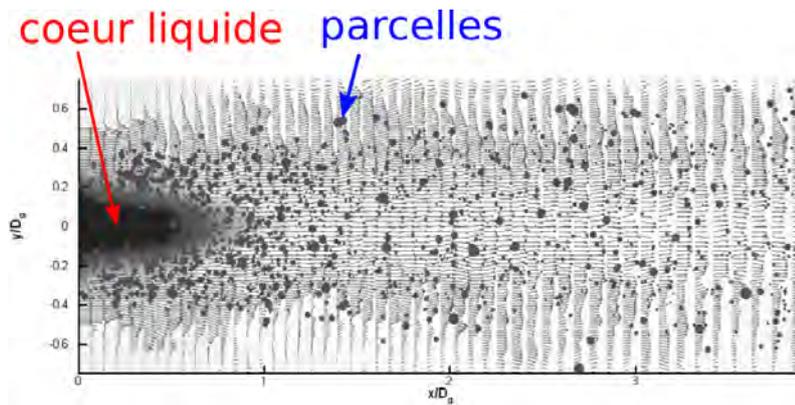


FIGURE 2.29. – Simulation stochastique de l'atomisation d'un jet liquide cisailé par courant gazeux : visualisation de la probabilité de présence du coeur liquide et de la transport des parcelles (population de gouttes) dans le champs de gaz résolu avec une LES, d'après Jouanguy [87].

2.3.2.2. Modèle ELSA

Le modèle ELSA (Eulerian Lagrangian Spray Atomization) a été initialement développé par Vallet et al. [173] puis repris par de nombreux auteurs, Blokkeel et al. [26], Beau [17], Lebas [99], Luca et al. [110], Ning et al. [122], Figure 2.30. L'objectif de ce modèle est de représenter fidèlement l'atomisation d'un spray diesel mais à moindre coût. Pour cela, une approche eulérienne est utilisée pour décrire les zones denses, proches de l'injecteur où se déroulent des interactions fortes entre l'écoulement gazeux et le cœur liquide. À contrario, en aval de l'injecteur, lorsque le spray est suffisamment dilué l'approche la plus adaptée qui a été retenue est lagrangienne.

La formulation eulérienne employée considère le milieu diphasique comme un mélange complexe des phases liquides et gazeuses, en les représentant comme un seul fluide avec des propriétés physiques fortement variables (densité, viscosité). Une des hypothèses principales de ce modèle repose sur le fait que l'atomisation est essentiellement pilotée par la turbulence, ce qui s'oppose aux modèles décrits précédemment, WAVE et TAB.

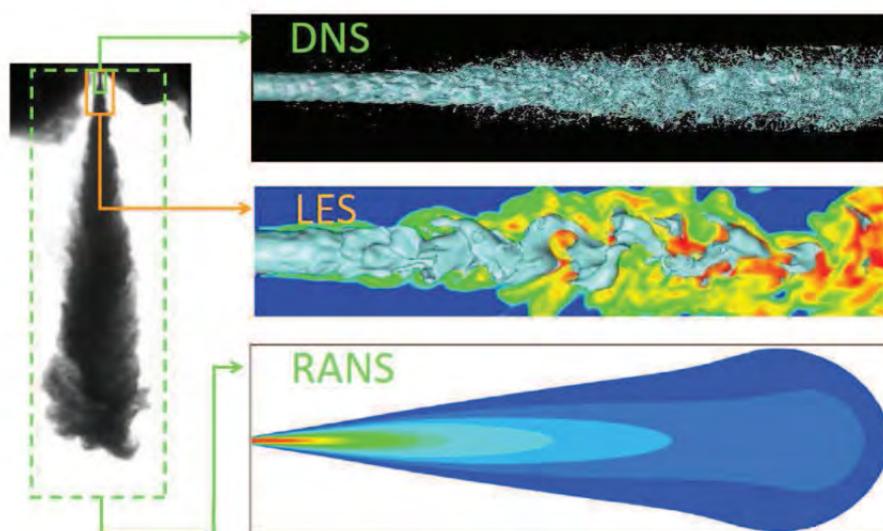


FIGURE 2.30. – Récapitulatif des différents formalismes utilisés pour la simulation et la modélisation de l'atomisation primaire. Représentation des échelles résolues par chaque formalisme. De haut en bas : DNS de Menard et al. [117], LES de Chesnel et al. [36] et simulation RANS de Lebas et al. [101], d'après Duret [54].

Le modèle ELSA possède une équation de transport supplémentaire décrivant l'évolution de la densité d'interface. Cette dernière représente localement le rapport entre la surface de l'interface liquide gaz et le volume de la cellule analysée. En connaissant cette quantité ainsi que la fraction volumique moyenne, une estimation locale d'une taille de goutte produite par atomisation est possible. Néanmoins, la fermeture de cette équation de transport de densité d'interface pose quelques difficultés puisque cela nécessite de modéliser des termes de production (étirement) et de destruction (coalescence) de l'interface qui dépendent de mécanismes complexes. De plus, les modèles de fermetures n'ont jamais été testés dans des configurations où le corps liquide est sujet à des instabilités majeures, comme les oscillations d'une nappe liquide.

Origine et modélisation de la densité d'interface pour l'atomisation

Le concept de densité d'interface est décrit dans ce chapitre en commençant par une définition générale puis en mettant en avant les différents types de modèles employés en atomisation.

Deux courants d'applications de la densité d'interface en atomisation sont résumés par la suite. Le premier fait l'hypothèse d'une zone d'utilisation de type phase dispersée, où les structures sont assimilées à des gouttes au sein d'un vaste domaine gazeux. Le second n'utilise aucune considération topologique sur l'interface liquide-gaz. Pour cette raison une multitude de modèles existent en fonction des hypothèses finales choisies.

Sommaire

3.1. Définitions et généralités	48
3.1.1. Équation de transport d'interface réactive et première modélisation . . .	50
3.1.2. Construction de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz	50
3.2. Modélisations avec hypothèses de phase dispersées	51
3.2.1. Modèle de Iyer	51
3.2.1.1. Destruction par évaporation	51
3.2.1.2. Production par rupture	52
3.2.1.3. Destruction par coalescence	52
3.3. Modélisations sans hypothèses de phases dispersées	53
3.3.1. Modèle de Vallet	53
3.3.1.1. Production par l'étirement des grandes échelles	54
3.3.1.2. Production par l'étirement des petites échelles	54
3.3.1.3. Destruction par coalescence	54
3.3.2. Modèle de Jay	55
3.3.2.1. Production par instabilité interfaciale	55
3.3.2.2. Production par rupture	56
3.3.2.3. Destruction par évaporation	56
3.3.3. Modèle de Lebas	56
3.3.3.1. Production initiale	58
3.3.3.2. Production causée par la turbulence	58
3.3.3.3. Destruction par collisions et coalescences	58
3.3.3.4. Destruction par rupture secondaire	59
3.3.3.5. Destruction par évaporation	60
3.3.4. Modèle de Chesnel	60
3.3.4.1. Densité d'interface résolue	62
3.3.4.2. Production interne	62

3.1. Définitions et généralités

La connaissance de l'interface et de sa topologie est primordiale en atomisation car cela conditionne directement les échanges de masses, quantités de mouvements et d'énergies entre les phases liquides et gazeuses. Dans le cadre de simulations d'atomisation, une bonne résolution de l'interface est cruciale, notamment dans la zone à phase séparée, où ce phénomène débute. En effet, une multitude de structures liquides peuvent apparaître, vagues, ligaments, gouttes, et conditionnent la suite du processus de fragmentation. De plus, si cette interface est sous-résolue, des informations topologiques sont perdues, synonyme d'un lissage ou perte de l'interface. Un tel exemple est visible Figure 3.1, avec deux profils de simulations de nappes liquides cisailées (rouge et noir) pour deux instants successifs. Les deux interfaces liquide-gaz sont définies par un iso-contour de la valeur de la LS tel que $\phi = 0$ et sont représentés, pour deux maillages. Le premier, très résolu, représente un calcul DNS en rouge tandis que le second, moins résolu, en noir représente un calcul DNS plus grossier ayant une taille de maille (Δ) équivalente à un calcul LES.

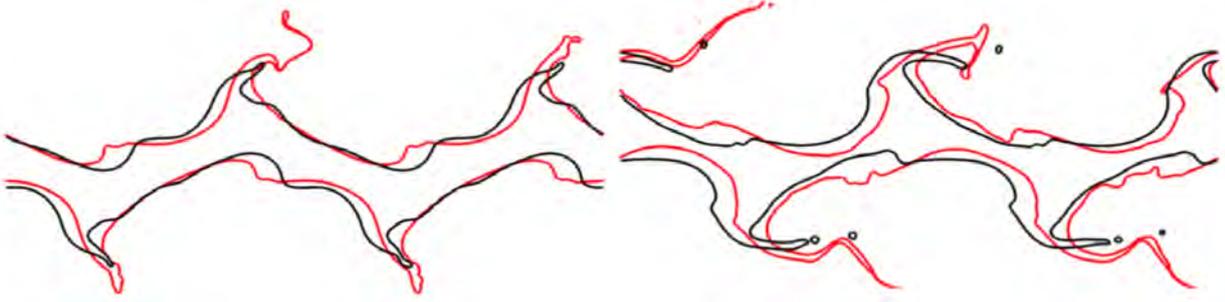


FIGURE 3.1. – Isocontour $\phi = 0$, Δ_{DNS} (rouge), $\Delta_{LES} = 16 \Delta_{DNS}$ (noir).

La résolution de la simulation agit sur la simulation du processus d'atomisation au-travers de sa topologie liquide. En effet, comme visible sur la Figure 3.1, le développement des grandes échelles de l'interface sont analogues pour les deux types de simulations (DNS et LES) avec quelques différences concernant les plus petites.

Ces différences sont visibles à divers endroits du profil de l'interface. Tout d'abord, dans le cas raffiné DNS, proche de l'axe de symétrie de la nappe cisailée, des instabilités surfaciques supplémentaires sont présentes et perturbent l'interface. D'autre part, induit par le cisaillement gazeux aux sommets des vagues, de très fines structures liquides se développent tout en s'étirant et s'allongeant. A contrario, pour la simulation LES, le corps principal liquide paraît plus stable, moins oscillant, tandis que les extrémités des vagues sont plus courtes, moins allongées et paraissent plus épaisses. Par ailleurs, rupture des ligaments est anticipée par le maillage LES, car l'approche VOF impose la conservation locale de la masse.

Dans le cadre de simulations d'atomisations en LES, les maillages sont moins résolus qu'en DNS afin d'atteindre des temps de restitutions raisonnables. Ceci implique une perte d'informations sur la topologie de l'interface liquide-gaz, quelque soit la méthode numérique employée pour la décrire. Pour combler ce déficit et ainsi récupérer l'information manquante sur la topologie de l'interface, l'utilisation d'une modélisation sous maille de la densité d'interface paraît particulièrement adaptée. En effet, cette notion s'abstient de considérations géométriques pour décrire l'évolution de l'interface ce qui est donc directement applicable dans un calcul LES.

Par définition, la densité d'interface, Σ , est le rapport entre la surface totale de l'interface au sein d'un volume de contrôle (rouge continu), S , et ce même volume de contrôle (noir), V , Figure 3.2a.

$$\Sigma = \frac{S}{V} \quad (3.1)$$

Le concept de la densité d'interface représente l'état d'un ou de plusieurs amas au sein d'un volume de contrôle, Figure 3.2a. De plus, les évolutions de cette quantité peuvent refléter différents

processus d'atomisations, Figure 3.2b. Dans cet exemple, le premier est le plissement de l'interface, qui accroît la surface interne et donc Σ . Le second concerne la fragmentation des structures liquides, qui en se scindant génère plus de surface interne et augmente donc Σ .

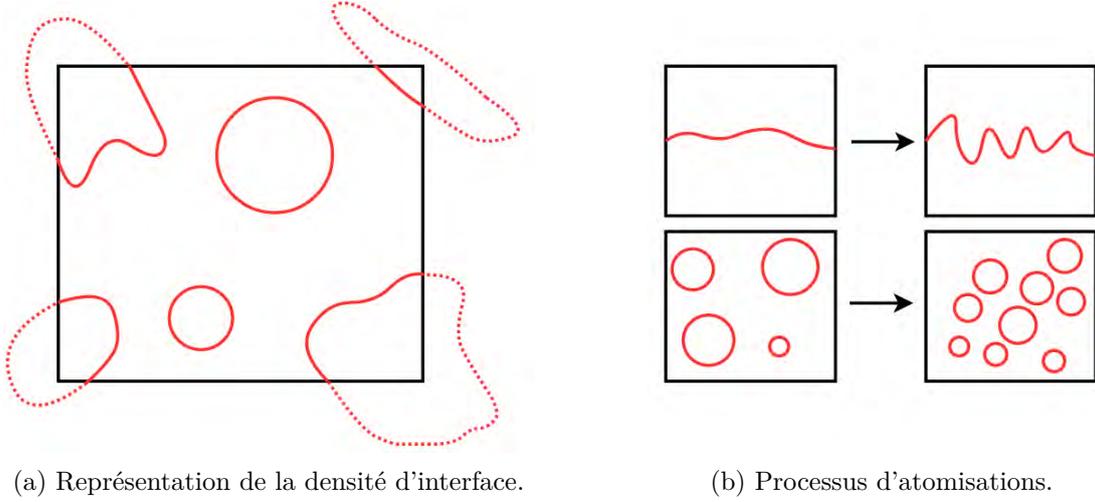


FIGURE 3.2. – Concept de la densité d'interface et ses possibles évolutions.

La notion de densité d'interface est intrinsèquement bien adaptée aux zones sous-résolues puisque son rôle doit être capable de prendre en compte des phénomènes physiques présents au sein du volume de contrôle (par la suite dit sous-maille). Les différents étapes de l'atomisation sous-maille sur un maillage LES, tel le plissement de l'interface, l'arrachement de gouttes mais aussi la coalescence ou la fragmentation, doivent être récupérées et représentées par cette quantité.

Une des premières définition de la densité d'interface locale fut donnée par Delhayé [46] :

$$\Sigma = \frac{1}{V} \oint_V \delta_s dv \quad (3.2)$$

Où δ_s est un dirac de la fonction indicatrice de phase représentant l'interface. Cette définition illustre bien qu'une augmentation de la densité d'interface correspond à une interface au sein de la cellule plus perturbée, synonyme de plissement, de fragmentation interne, ou plus généralement d'évolution de l'atomisation, Figure 3.2.

La densité d'interface permet de compléter la description d'écoulements diphasiques. Cette dernière est particulièrement utile pour décrire les débuts d'atomisations, en fin de zone dense, lorsque différents amas liquide peuvent coexister. Par ailleurs, son domaine d'application s'étend jusqu'aux zones diluées où, un diamètre de Sauter équivalent est récupérable, d_{32} , inférieur à la taille locale du maillage à l'aide de la fraction volumique liquide, Y_l . De plus, un nombre de gouttes, Ng , sous-maille représentatif d'une distribution de gouttes monodisperses est atteignable grâce au d_{32} , à Y_l et Σ .

$$d_{32} = \frac{6Y_l}{\Sigma} \quad \& \quad Ng = \frac{6Y_l}{\pi d_{32}^3} \quad (3.3)$$

3.1.1. Équation de transport d'interface réactive et première modélisation

Historiquement, la construction de la densité d'interface s'est largement inspirée du concept de surface de flamme en combustion.

Grâce au formalisme de Marble and Broadwell [114] sur le concept de surface de flamme tout en utilisant le formalisme de Pope [138], Candel and Poinso [30] parviennent à une équation de transport-diffusion de la densité de surface de flamme.

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial(u_i + S_L n_i) \Sigma}{\partial x_i} = \left[(v_i v_j + \eta_i \eta_j) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] \Sigma + S_L \Sigma \frac{\partial n_i}{\partial x_i} \quad (3.4)$$

Avec v_i et η_i les vecteurs définissant le plan tangent à la surface de flamme, n_i le vecteur normal à la surface de flamme et S_L la vitesse de flamme laminaire.

Duclos et al. [51] s'inspirèrent de cette formulation et proposèrent une approche moyenne avec une vision plus phénoménologique :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i \bar{\Sigma})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_{turb}}{Sc_{turb}} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + S_1 + S_2 + S_3 - D \quad (3.5)$$

Cette nouvelle modélisation fait ressortir plusieurs termes sources relatifs aux phénomènes physiques régissant la surface de flamme, listés ci-dessous :

- La diffusion turbulente Σ , modélisée par une loi gradient $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_{turb}}{Sc_{turb}} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right)$
- L'étirement par le champs de vitesse moyen S_1
- L'étirement induit par les mouvements turbulents S_2
- Terme source induit par le gradient de fraction massique S_3
- L'effet de la réaction de combustion elle-même D

Les phénomènes régissant le comportement d'une surface de flamme ou d'une interface en atomisation possèdent de grandes similarités. Les mécanismes modélisant l'évolution de cette quantité comme l'étirement moyen, la diffusion turbulent etc s'appliquent aux deux configurations et sont donc quasiment directement transposables.

3.1.2. Construction de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz

Plusieurs approches sont possibles pour établir une équation de transport de la densité d'interface en diphasique. Les principales différences entre ces approches commencent lors de l'analyse des termes sources ou puits. Ces derniers doivent être représentatifs de mécanismes spécifiques de production et de destruction d'interfaces tels que le plissement, la fragmentation, la vaporisation, la coalescence etc.

- La première approche consiste à s'intéresser directement à l'équation de transport de la quantité d'interface locale et faire apparaître les termes à modéliser après intégration sur un volume de contrôle V . Cette méthode est délicate car l'aire interfaciale est par définition une fonction de Dirac centrée sur l'interface. Cette dernière a été successivement développée par Delhaye [46], Morel et al. [119], Morel [118] pour obtenir une équation de transport de densité d'interface moyenne. L'intégration de cette quantité fait apparaître des termes supplémentaires. Leurs identifications et leurs analogies avec les phénomènes physiques ne sont pas aisées et sont toujours en cours.

- La deuxième approche utilise de fortes hypothèses initiales pour simplifier la fermeture des termes sources. Cette approche est employée dans le cadre simplifié d'écoulements diphasiques en phase dispersée. C'est-à-dire qu'une hypothèse sur la topologie des structures est faite en ne raisonnant qu'au-travers de gouttes liquides sphériques. Grâce à cela, une équation exacte pour la densité d'interface est obtenue par une intégration sur tous les diamètres de la surface des gouttes. Les termes sources qui apparaissent doivent être modélisés dans des conditions spécifiques de sprays dispersés. Des exemples de cette approche se trouvent dans les travaux de Kocamustafaogullari and Ishii [91], Iyer et al. [85], Iyer and Abraham [84] mais aussi ceux de Wan and Peters [177].
- La dernière approche assimile l'interface à une quantité de surface de contact entre les phases liquides et gazeuses, sans hypothèse topologique initiale. Cette approche est basée sur des analogies phénoménologiques entre l'atomisation diphasique et les écoulements gazeux réactifs turbulents, décrits dans 3.1.1. En effet, le concept de surface de flamme développé par Marble and Broadwell [114] ainsi que l'équation de transport moyenne associée de Duclos et al. [51], équations (3.4) et (3.5) semblent transposables. Les premiers travaux utilisant ces hypothèses ont été réalisés par Vallet [172], Vallet et al. [173] qui font le postulat d'une équation de transport avec des termes sources, représentatifs des phénomènes physiques rencontrés. De ces premiers travaux s'ensuivirent ceux de Blokkeel et al. [26], Beau et al. [18], Lebas et al. [100], Jay et al. [86], Beheshti et al. [20], Sidhu and Burluka [160], avec différentes modélisations et termes sources. L'avantage de cette approche concerne son application transposable à des configurations très différentes, au-travers d'une adaptation des termes sources. L'inconvénient est la nécessité de devoir valider chaque nouvelle modélisation, formulation des termes sources pour chaque cas d'étude.

3.2. Modélisations avec hypothèses de phase dispersées

3.2.1. Modèle de Iyer

Iyer and Abraham [84], Iyer et al. [85] ont proposé un modèle de transport de la densité d'interface dans le cadre d'une approche multi-fluide du spray. C'est-à-dire que deux jeux d'équations décrivant chaque phase (en formulation eulérienne) sont résolus avec des termes de transferts (masse, quantité de mouvement, énergie). Ces termes de transferts, la traînée par exemple, nécessitent un diamètre de goutte équivalent d_{32} calculé à partir de la densité d'interface Σ et de la fraction volumique du liquide, Y_l .

$$d_{32} = \frac{6\bar{Y}_l}{\bar{\Sigma}} \quad (3.6)$$

Dans le cas d'écoulement dispersés diphasiques, une hypothèse courante considère que la vitesse de l'interface est égale à la vitesse de la phase dispersée, à savoir celle du liquide. Suite à cela, une équation de transport pour la densité d'interface est proposée :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_l \bar{\Sigma})}{\partial x_i} = \dot{\bar{\Sigma}}_{evap} + \dot{\bar{\Sigma}}_{rup} + \dot{\bar{\Sigma}}_{coll} \quad (3.7)$$

Avec \bar{u}_l la vitesse liquide. Le premier terme source tient compte du fait que la densité d'interface décroît lors d'évaporation des gouttes liquides. Le second terme représente l'augmentation de la densité d'interface lorsqu'une goutte est fractionnée en plusieurs gouttes, tandis que le dernier représente la chute de cette valeur dans le cas de coalescence.

3.2.1.1. Destruction par évaporation

Pour obtenir le terme puits représentant la destruction par évaporation, Iyer et al. [85] relie la densité d'interface avec le diamètre équivalent des structures liquides, d_{32} :

$$\bar{\Sigma} = \pi d_{32}^2 Ng \quad Ng = \frac{6\bar{Y}_l}{\pi d_{32}^3} \quad \bar{\Sigma} = \frac{6\bar{Y}_l}{d_{32}} \quad (3.8)$$

Sachant que Ng représente le nombre de gouttes par unité de volume et d_{32} le diamètre équivalent d'une d'entre elles. Iyer utilisa l'équation (3.8) pour dimensionner le terme puits représentant le terme d'évaporation avec la loi du d^2 .

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{evap} = -K_v \frac{\bar{\Sigma}}{d^2} = -K_v \frac{\bar{\Sigma}^3}{36\bar{Y}_l^2} \quad (3.9)$$

Avec K_v est le coefficient d'évaporation. Ce terme source est obtenu à partir de l'hypothèse de gouttes sphériques sous-mailles. D'autres travaux ont été réalisés par Burluka and Borghi [29] pour améliorer cette approche, notamment afin de prendre en compte l'évaporation par unité de surface en fonction de l'étirement local.

3.2.1.2. Production par rupture

Le terme source de "rupture" dans cette équation de transport de densité d'interface liquide/gaz est basé sur le modèle WAVE de Reitz and Diwakar [149]. Ce terme source représente l'augmentation de la densité d'interface à cause de ruptures liquides. Le point de départ de la modélisation de ce terme est la loi de décroissance du rayon.

$$\frac{dd}{dt} = -\frac{d - d_c}{\tau_{rup}} \quad (3.10)$$

Avec d_c le diamètre critique et τ_{rup} le temps caractéristique de rupture des structures liquides jusqu'à obtention de la distribution finale. Pour plus de précision voir la section 2.3.2.1.4. En considérant cette loi d'évolution avec la relation liant de diamètre des gouttes à la densité d'interface, équation (3.2), le terme source devient :

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{rup} = \frac{\bar{\Sigma}}{\tau_{rup}} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}_c} \right) \quad (3.11)$$

Avec $\bar{\Sigma}_c$ représentant la densité d'interface liquide/gaz liée au diamètre critique. Ce modèle d'évolution de la quantité d'interface est donc directement relié à celui de Reitz.

3.2.1.3. Destruction par coalescence

La destruction de densité d'interface par coalescence représente la perte de surface lorsque deux gouttes entrent en collision et fusionnent. Afin de modéliser ce phénomène, Iyer and Abraham [84] proposent de définir une fréquence de collision entre ces deux gouttes, qui est obtenue en suivant les travaux d'O'Rourke and Bracco [129] ainsi que Gidaspow [65].

$$f_{coll} = Ng^2 \frac{\pi d_{32}^2}{2} U_l' \quad (3.12)$$

Avec Ng le nombre de gouttes par unité de volume, d_{32} leur diamètre équivalent et U_l' la vitesse d'agitation intergouttes qui peut être considérée comme étant liée à l'énergie cinétique turbulente du liquide, k_l :

$$U_l' = C_{coll} \sqrt{\frac{2k_l}{3}} \quad (3.13)$$

Avec C_{coll} une constante de modélisation. Toutefois deux gouttes rentrant en collision ne coalescent pas systématiquement. Elles peuvent rebondir ou même se rompre. Pour cette raison, une probabilité de coalescence, η_{coll} , est définie :

$$\eta_{coll} = \min \left(2.4 \frac{g(\xi)}{We_c}, 1 \right) \quad (3.14)$$

Le terme $g(\xi)$ vaut 1.3 dans le cas présent, d'après les travaux de O'Rourke [127]. Le Weber collisionnel est défini à partir de la vitesse d'agitation intergouttes, illustrant la capacité d'une goutte à résister à une collision.

$$We_c = \frac{\rho_l U_l'^2 d_{32}}{\Sigma} \quad (3.15)$$

Le taux d'évolution du nombre de gouttes par unité de volume due à la coalescence s'écrit donc :

$$\frac{dNg}{dt} = -\eta_{coll} f_{coll} \quad (3.16)$$

Le terme de destruction final s'écrit donc :

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{coll} = -\eta_{coll} \bar{\Sigma}^2 \frac{U_l'}{12} \quad (3.17)$$

Le modélisation de Iyer pour ce terme source ne prend en compte qu'une diminution de la densité d'interface lorsque des gouttes se percutent. Néanmoins, le contraire est tout autant possible. Deux gouttes rentrant en collision peuvent éclater en une multitude de plus petite taille et ainsi faire croître la densité d'interface.

Enfin, une autre limitation concerne le modèle de rupture, extrait des méthodes lagrangiennes, qui s'applique qu'à la rupture primaire.

3.3. Modélisations sans hypothèses de phases dispersées

3.3.1. Modèle de Vallet

Vallet et al. [173] postulent une formulation originale du transport de la densité d'interface moyenne dans le cadre d'applications à l'atomisation assistée. En effet, dans leurs travaux, aucune hypothèse sur la topologie de l'interface sous-maille n'est faite. Cette démarche les différencie des modélisations d'interfaces liquide/gaz issues des modèles lagrangiens qui font le postula d'être dans des zones dispersées, avec une phase liquide assimilée à des gouttes sphériques espacées les unes des autres.

Cette formulation a été proposée initialement pour le modèle ELSA (modèle Euler-Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation) dans un formalisme RANS. De plus, le système d'injection choisi pour l'application du modèle était un spray coaxial avec des écoulements à hauts nombres de Weber et Reynolds.

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_i \bar{\Sigma})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_s \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + (A + a) \bar{\Sigma} - V_s \bar{\Sigma}^2 \quad (3.18)$$

Avec D_s qui est un coefficient de diffusion, $1/A$ et $1/a$ sont deux échelles de temps relatives à la production et V_s est un coefficient homogène à une vitesse. De part sa construction, une distinction est possible entre les différentes contributions de la densité moyenne d'interface :

- L'étirement moyen induit par les grandes échelles de la turbulence A
- L'étirement dû aux plus petites échelles de la turbulence a
- La coalescence $V_s \bar{\Sigma}^2$

3.3.1.1. Production par l'étirement des grandes échelles

L'étirement moyen est modélisé à l'aide du tenseur de Reynolds par une loi de type gradient :

$$A = \frac{\widetilde{u_i'' u_i''}}{\widetilde{k}} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.19)$$

Cette formulation du terme source représente l'action macroscopique du gradient de vitesse moyenne (correspondant à l'instabilité de Kelvin-Helmholtz). De cette manière l'augmentation de la densité d'interface est assurée en présence de fortes contraintes turbulentes et de forts gradients de vitesse.

3.3.1.2. Production par l'étirement des petites échelles

La turbulence étant un phénomène plissant l'interface, Vallet et al. [173] estiment que a^{-1} doit être proportionnel à un temps turbulent τ_{turb} . En effet, l'action microscopique de la turbulence sur la densité d'interface est liée à l'échelle de temps de Kolmogorov [92], $\tau_k = \tau_{turb} Re_{turb}^{-1/2}$.

De plus, en se basant sur des observations antérieures, Vallet et al. [173] estimèrent que le processus prépondérant dans la production de densité d'interface est la rupture par collision entre amas au détriment de l'étirement turbulent. C'est pourquoi, le terme source est modélisé comme un terme de production piloté par un temps turbulent mais prenant en compte les phénomènes de collisions entre les paquets liquides.

$$a = a_{coll} = \frac{C}{(36\pi)^{\frac{2}{9}}} (l_{turb} \overline{\Sigma})^{\frac{2}{3}} \left(\frac{\rho_l}{\overline{\rho} \widetilde{Y}_l} \right)^{\frac{4}{9}} \frac{1}{\tau_{turb}} \quad (3.20)$$

Avec l_{turb} une longueur caractéristique de turbulence, \widetilde{Y}_l , la fraction volumique du liquide et C une constante.

3.3.1.3. Destruction par coalescence

Pour déterminer ce terme puits de densité d'interface, l'hypothèse d'équilibre entre les phénomènes de coalescences et de ruptures loin du nez de l'injecteur est faite.

$$a_{coll} \overline{\Sigma} = V_s \overline{\Sigma}^2 \quad (3.21)$$

Cette considération permet de déduire l'expression de V_s :

$$V_s = \frac{a_{coll} \rho_l d_c}{6 \overline{\rho} \widetilde{Y}_l} \quad (3.22)$$

Avec d_c un diamètre de gouttes équivalent lors de l'équilibre entre ces deux phénomènes.

$$d_c = 2 \frac{\sigma^{\frac{3}{5}} l_{turb}^{\frac{2}{5}}}{\widetilde{k}} \frac{(\overline{\rho} \widetilde{Y}_l)^{\frac{2}{15}}}{\rho_l^{\frac{11}{15}}} \quad (3.23)$$

Par ailleurs, Vallet et al. [173] font le postulat d'un état stable atteint par la phase liquide lorsque, localement, les forces d'inerties sont compensées par les forces de tension de surfaces. Cette nouvelle hypothèse permet de relier le diamètre représentatif des gouttes, d_c , à un calcul de Weber. Pour Vallet [172], Vallet et al. [173], la valeur de ce Weber critique est constant et de l'ordre de l'unité.

$$We_c = \rho_g \frac{\widetilde{k} d_c}{2\sigma} \simeq 1 \quad (3.24)$$

Cette relation exprime le fait que pour une énergie cinétique turbulente donnée, un diamètre d'équilibre existe, vers lequel les gouttes se stabilisent.

La forme générale de l'équation de transport de densité d'interface ne suppose pas initialement la présence de gouttes. Néanmoins, cette hypothèse a été utilisée pour fermer le terme source lié à la coalescence.

3.3.2. Modèle de Jay

Jay et al. [86] s'inspirent des travaux de Vallet et al. [173] pour formuler leur propre équation de transport de la densité d'interface, toujours dans un contexte d'injecteurs coaxiaux en aéronautique. Les travaux de Jay et al. [86], au-travers des termes sources de l'équation de transport, prennent en compte de nouveaux phénomènes, tels que les instabilités proches de l'injecteur, les phénomènes de ruptures liquides secondaires ou encore l'évaporation.

Une partie de cette nouvelle modélisation s'appuie sur les travaux expérimentaux et théoriques de Lasheras et al. [97]. Ces derniers ont mis en évidence le type d'instabilité à l'origine du processus d'atomisation primaire pour certains injecteurs coaxiaux.

L'équation de transport finale de la densité d'interface est de la forme :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_i \bar{\Sigma})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_{turb}}{Sc_{turb}} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) = \dot{\bar{\Sigma}}_{instab} + \dot{\bar{\Sigma}}_{rup} + \dot{\bar{\Sigma}}_{evap} \quad (3.25)$$

Avec le rapport ν_{turb} la viscosité cinématique turbulente et Sc_{turb} le nombre de Schmidt associé. Le premier terme source, $\dot{\bar{\Sigma}}_{instab}$, tient compte des instabilités interfaciales proches de l'injecteur qui perturbent et augmentent la densité d'interface. Le second, $\dot{\bar{\Sigma}}_{rup}$, traduit l'augmentation de la densité d'interface lors de rupture secondaire des gouttes tandis que le dernier, $\dot{\bar{\Sigma}}_{evap}$, représente la chute de cette valeur lorsque les gouttes s'évaporent.

3.3.2.1. Production par instabilité interfaciale

Le terme source $\dot{\bar{\Sigma}}_{instab}$ illustre une production d'interface liée aux instabilités de cisaillements et s'exprime de la manière suivante :

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{instab} = b_1 \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{\Delta U}{2\bar{Y}_l \ln(\bar{Y}_l c)} \left(\frac{\partial \bar{Y}_l}{\partial x_i} \right) \bar{\Sigma} \left(1 - \left(\frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}_{fin}} \right)^2 \right)^{1/2} h \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}_{fin}} \right) \quad (3.26)$$

Avec ΔU , le différentiel initial de vitesse entre les deux phases, $\bar{Y}_l c = 10^{-2}$ une constante qui indique la valeur critique de fraction volumique liquide en dessous de laquelle le glissement entre les phases est supposé nul. La fonction Heavyside est notée h tandis que $\bar{\Sigma}_{fin}$ désigne la densité d'interface maximale atteinte sous l'effet d'instabilités. Cette dernière est définie :

$$\frac{1}{\bar{\Sigma}_{fin}} = \frac{2}{\bar{\Sigma}_{init}} e^{-B \frac{L_{rup}}{\delta} \frac{1}{MFR^{1/3}}} \quad (3.27)$$

Sachant que $\bar{\Sigma}_{init}$ désigne la quantité de densité interfaciale initiale, L_{rup} une longueur caractéristique de rupture définie par :

$$L_{rup} = C \frac{d_{inj}}{MFR^{1/3}} \quad (3.28)$$

MFR désigne le rapport du flux de quantité de mouvement gaz/liquide, δ l'épaisseur de la couche de mélange entre le liquide et le gaz. Pour finir plusieurs constantes de modélisations sont utilisées, $b_1 = 5$, $C = 10$ et $B = 2.5 \cdot 10^{-3}$.

L'expression de ce terme source met en évidence un processus de croissance de la densité d'interface bornée par une valeur finale, $\bar{\Sigma}_{fin}$. L'instabilité de cisaillement affecte et perturbe l'interface jusqu'à une certaine valeur maximale. Cette modélisation est relativement proche de celle de Vallet et al. [173] avec le terme source lié au cisaillement moyen et au gradient de vitesse

local, équation (3.19). La seconde partie du terme source vient de la saturation de l'instabilité linéaire.

3.3.2.2. Production par rupture

La croissance des instabilités de surface est suivie par la formation de ligaments qui se rompent en gouttes plus petites. Cette cascade de fragmentations est représentée par le terme source $\dot{\bar{\Sigma}}_{rup}$.

Cette phase d'atomisation, dites secondaire, est caractérisée par un modèle lagrangien adapté à ce type de rupture. Jay et al. [86] ont utilisé le modèle TAB (Taylor Analogy Breakup) d'O'Rourke and Amsden [128] pour représenter ce phénomène et le terme source associé.

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{rup} = (2^{\frac{2}{3}} - 1) \frac{\bar{\Sigma}}{\tau_{rup}} h(r - r_c) \quad (3.29)$$

Le temps caractéristique de rupture, τ_{rup} , est défini à partir de l'équation (2.41).

$$\tau_{rup} = C \sqrt{\frac{\bar{\rho} d^3}{8\sigma}} \quad \text{avec} \quad d = \frac{6\bar{Y}_l}{\bar{\Sigma}} \quad (3.30)$$

Avec la constante $C = 10.0$. Par ailleurs, le rayon critique est obtenu de la manière suivante :

$$r_c = \frac{1}{2} \left(We_c \frac{\sigma}{\rho_g} \right)^{\frac{3}{5}} \bar{\tau}^{-\frac{2}{5}} \quad (3.31)$$

La densité de surface croît tant jusqu'à atteindre la densité de surface critique correspondant au rayon liquide. Dans cette modélisation, le Weber critique est assimilé à une constante, égale à 0.3.

3.3.2.3. Destruction par évaporation

Pour modéliser le terme de destruction de densité d'interface par évaporation, $\dot{\bar{\Sigma}}_{evap}$, Jay et al. [86] utilisent une modélisation similaire à celle de Iyer et al. [85], section 3.2.1.1. De manière plus générale, la plupart des auteurs voulant représenter ce phénomène, réutilisent cette formulation en faisant l'hypothèse d'une phase liquide dispersée. Ce postulat est cohérent car les effets de l'évaporation ne deviennent significatifs que lorsque les structures liquides émises se retrouvent à l'état de gouttes, lorsque le spray est formé.

Dans cette modélisation Jay et al. [86] se basent sur un modèle lagrangien d'évaporation modélisé par la loi du d^2 .

$$d^2 = d_{init}^2 - \beta_v t \quad (3.32)$$

Avec la constante β_v qui représente le coefficient d'évaporation. L'expression du terme source $\dot{\bar{\Sigma}}_{evap}$ est similaire à celle de Iyer et al. [85] :

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{evap} = -\frac{\beta_v}{36} \frac{\bar{\Sigma}^3}{\bar{Y}_l^2} \quad (3.33)$$

Sachant que le coefficient d'évaporation, β_v , s'exprime comme une fonction du nombre de Spalding, B_T , et du nombre de Prandtl, Pr .

$$\beta_v = 8D_g \frac{\rho_g}{\rho_l} \ln(1 + B_T) (1 + 0.276 \sqrt{Re_d} Pr^{\frac{1}{3}}) \quad (3.34)$$

3.3.3. Modèle de Lebas

Les travaux de Lebas [99], Lebas et al. [100, 101] utilisent un transport de densité d'interface massique, couplé avec le modèle ELSA, pour simuler le processus d'atomisation d'un jet diesel.

Comme Vallet et al. [173], les écoulements diphasiques ont été résolus avec une approche mono-fluide, multi-espèces, et en représentant le liquide et le gaz par des densités variables. Le modèle développé par Lebas [99], Lebas et al. [100, 101] s'inspire de la formulation de Beau [17], Beau et al. [18, 19] et plus généralement des travaux de Ménard et al. [121], Menard et al. [117] pour la description de certains termes sources.

L'équation de transport de densité d'interface massique, Ω , obtenue est donc :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\Omega}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\Omega}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \tilde{\Omega} (\tilde{u}_i - \tilde{u}_i|_{\Omega}) \right) + \psi \left(\bar{\rho} \tilde{\Omega}_{den} \right) + (1 - \psi) \left(\bar{\rho} \tilde{\Omega}_{disp} \right) + \bar{\rho} \tilde{\Omega}_{evap} \quad ; \quad \tilde{\Omega} = \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\rho}} \quad (3.35)$$

Avec $\tilde{u}_i|_{\Omega}$ la vitesse de l'interface qui est inconnue. Ce différentiel de vitesse est modélisé par la suite au moyen d'un terme de diffusion turbulent.

Une première décomposition des termes sources, en fonction des zones de l'écoulement, a été faite. Ainsi, suivant la répartition de la phase liquide localement, phase dense ou dispersée, certains termes sources seront, ou non, activés d'après l'équation (3.35).

Le premier d'entre-eux, $\tilde{\Omega}_{den}$, agit dans la zone proche de l'injecteur, où se situe de forts taux de fraction volumique liquide Y_l . Le liquide est concentré dans une zone restreinte de l'écoulement de façon continue, ce qui caractérise une phase liquide dense.

Le deuxième, $\tilde{\Omega}_{disp}$ s'active en aval de l'injecteur, lorsque le taux de fraction volumique est beaucoup plus bas. Cet indicateur est significatif d'une zone dispersée avec une répartition du liquide beaucoup plus continue, synonyme d'un spray de gouttes formés.

Pour relier continuellement la phase dense à celle dispersée, une fonction de répartition, ψ , est utilisée, Figure 3.3. Cette dernière est un indicateur de la dispersion, ou non, du liquide localement et permet donc de connaître les proportions d'activations des termes sources.

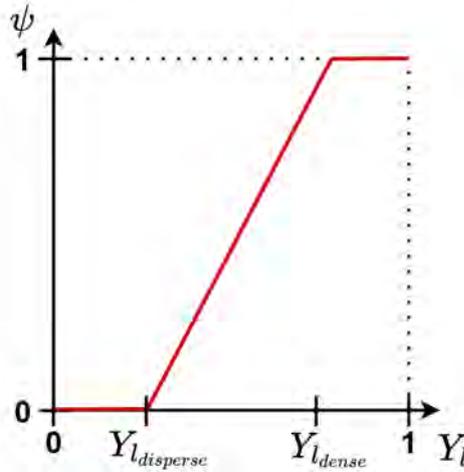


FIGURE 3.3. – Fonction indicatrice ψ utilisée pour délimiter les phases séparés et dispersée

Le premier seuil définissant la zone dense, Y_{den} , a été fixé à 0.5. Au-dessus de cette valeur, les gradients de fractions volumiques désignent des inclusions liquides dans du gaz ou les inclusions de gaz dans du liquide.

A l'opposé la valeur de la fraction volumique désignant un spray formé, Y_{disp} , est fixée à 0.1, ce qui est une valeur communément admise.

Une deuxième décomposition fut réalisée pour mieux modéliser tous les phénomènes présents dans chacune des zones précédemment décrites.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\Omega}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\Omega}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \frac{\nu_{turb}}{Sc_{turb}} \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial x_i} \right) + \psi \bar{\rho} \left(\tilde{\Omega}_{init} + \tilde{\Omega}_{turb} \right)$$

$$\begin{aligned}
 & + (1 - \psi) \bar{\rho} \left(\dot{\tilde{\Omega}}_{coll/coal} + \dot{\tilde{\Omega}}_{rup} \right) \\
 & + \bar{\rho} \dot{\tilde{\Omega}}_{evap}
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

La séparation des termes sources en fonction des zones de l'écoulement permet de mieux compartimenter leurs apports et ainsi d'être plus représentatif physiquement.

3.3.3.1. Production initiale

Le premier terme source, $\dot{\tilde{\Omega}}_{init}$, équation (3.36), est considéré comme un terme d'initialisation pour la densité d'interface massique. Ce terme correspond à la valeur initiale de production de la densité interfaciale induite par le mélange liquide/gaz, Beau [17], Beau et al. [18, 19].

$$\dot{\tilde{\Omega}}_{init} = \frac{12\mu_{turb}}{\rho_l \rho_g S c_{turb} l_{turb}} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} \tag{3.37}$$

Ce terme d'initialisation suppose une création d'interface proche de l'injecteur, en faisant l'hypothèse que les premières échelles des structures liquides soient proportionnelles à l'échelle intégrale de turbulence, l_{turb} .

3.3.3.2. Production causée par la turbulence

Le second terme source, principalement actif dans la zone dense, $\dot{\tilde{\Omega}}_{turb}$, équation (3.36), représente la production de surface provoquée par l'écoulement turbulent. Ce terme source regroupe deux des termes initialement utilisés par Beau [17], Beau et al. [18, 19]. En effet, $\dot{\tilde{\Omega}}_{turb}$ rassemble et modélise l'action simultanée des phénomènes de création et de destruction de densité d'interface en zone dense et dans un environnement turbulent.

$$\dot{\tilde{\Omega}}_{turb} = \frac{\tilde{\Omega}}{\tau_{turb}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_c} \right) \tag{3.38}$$

Cette formulation, qui découle du modèle de Reitz [148], illustre la croissance de l'interface jusqu'à une certaine valeur critique, $\tilde{\Omega}_c$, pendant un temps caractéristique turbulent, τ_{turb} .

Cette valeur critique, d'équilibre, $\tilde{\Omega}_c$, est définie au moyen d'un nombre de Weber turbulent. Celui-ci est le rapport entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie de surface :

$$We_{turb} = \frac{\bar{\rho} \tilde{k} \tilde{Y}_l}{\sigma \tilde{\Sigma}} = \frac{\tilde{k} \tilde{Y}_l}{\sigma \tilde{\Omega}} \tag{3.39}$$

Lebas et al. [100, 101] supposent qu'un régime d'équilibre est atteint entre la création et la destruction d'interface par la turbulence dans cette zone de l'écoulement. De cette hypothèse découle un équilibre entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie de surface. Cette constatation s'exprime donc au-travers un We_{turb} unitaire.

$$We_{turb} = \frac{\tilde{k} \tilde{Y}_l}{\sigma \tilde{\Omega}_c} = 1 \quad \text{avec} \quad \tilde{\Omega}_c = \frac{\tilde{k} \tilde{Y}_l}{\sigma} \tag{3.40}$$

Le terme source de production de densité d'interface massique lié aux phénomènes de turbulence en zone dense s'exprime donc :

$$\dot{\tilde{\Omega}}_{turb} = \frac{\tilde{\Omega}}{\tau_{turb}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega} \sigma}{\tilde{k} \tilde{Y}_l} \right) \tag{3.41}$$

3.3.3.3. Destruction par collisions et coalescences

Le terme puits, $\dot{\tilde{\Omega}}_{coll/coal}$, équation (3.36), représente les phénomènes de collisions et de coalescences ainsi que leurs impacts sur la densité d'interface massique. Les travaux de Lebas [99], Lebas

et al. [100, 101] réutilisent ceux de Beau [17], Beau et al. [18, 19] sur ce sujet.

La même formulation initiale, inspirée de Reitz [148], est utilisée pour définir le terme source $\dot{\tilde{\Omega}}_{coll/coal}$.

$$\dot{\tilde{\Omega}}_{coll/coal} = \frac{\tilde{\Omega}}{\tau_{coll}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}\sigma}{\tilde{\Omega}_c} \right) \quad (3.42)$$

Le temps caractéristique collisionnel, τ_{coll} , pilote ce phénomène de destruction jusqu'à ce que la densité d'interface massique atteigne le seuil, $\tilde{\Omega}_c$.

Plusieurs travaux et modélisations parlant de l'effet des collisions sur la densité d'interface furent analysés, Vallet et al. [173], Iyer et al. [85], Iyer and Abraham [84]. L'approche retenue se base sur la théorie des collisions particulières :

$$\tau_{coll} = \frac{L_{coll}^3}{S_{eff}U_{coll}} \quad (3.43)$$

Avec L_{coll} qui représente la distance moyenne entre les gouttes, S_{eff} la section efficace de collision et U_{coll} la vitesse caractéristique de collision. Ces paramètres ont été déterminés avec les approximations suivantes :

$$L_{coll} = N_d^{-\frac{1}{3}} = \frac{\rho_l^2 \bar{p} \tilde{\Omega}^3}{36\pi \tilde{Y}_l^2} \quad (3.44)$$

$$S_{eff} = \pi \left(\frac{6\tilde{Y}_l}{\rho_l \tilde{\Omega}} \right)^2 \quad (3.45)$$

$$U_{coll} \approx \sqrt{\frac{2}{3} \tilde{k}} \quad (3.46)$$

Ce terme est aussi une synthèse des termes sources représentant la coalescence et la collision de Beau et al. [18]. De la même manière que le terme source précédent, celui-ci met en évidence un régime d'équilibre entre les phénomènes de collisions et de coalescences. D'après Beau et al. [18] ce régime d'équilibre est défini à partir d'un diamètre d'équilibre :

$$d_c = d_{32} \frac{1 + \frac{We_c}{6}}{1 + \frac{We_{coll}}{6}} \quad (3.47)$$

Tout d'abord, le Weber collision, We_{coll} , est défini à partir d'une vitesse basée sur l'énergie cinétique turbulente :

$$We_{coll} = \frac{\rho_l \tilde{k} d_{32}}{\sigma} \quad (3.48)$$

Concernant le Weber critique, We_c , Beau et al. [18, 19] s'inspirent des travaux de Qian and Law [142] pour proposer $We_c = 15$. Néanmoins, Lebas et al. [100, 101] s'intéressent à l'équilibre entre les forces de tensions de surface et celles d'énergie cinétique, pour proposer la définition et la valeur de We_c :

$$\frac{1}{2} m U_l^2 = \sigma S \quad \text{avec} \quad We_c = \frac{\rho_l U_l^2 d_{32}}{\sigma} = 12 \quad (3.49)$$

3.3.3.4. Destruction par rupture secondaire

Le modèle de rupture secondaire s'inspire largement des modèles lagrangiens déjà présents dans la littérature.

$$\dot{\tilde{\Omega}}_{rup} = \max \left[\frac{\tilde{\Omega}}{\tau_{rup}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_c} \right); 0 \right] \quad (3.50)$$

Lebas et al. [100, 101] se sont inspirés de l'approche de Pilch and Erdman [135] pour déterminer le temps caractéristique de rupture secondaire, τ_{rup} , ainsi que le régime d'atomisation atteint, $\tilde{\Omega}_c$. Pilch and Erdman [135] mettent en évidence différents régimes de rupture secondaire en fonction du paramètre T et d'un nombre de Weber gazeux local :

$$T = \begin{cases} 6(We_g - 12)^{-0.25} & \text{pour } We_g < 18 \\ 2.45(We_g - 12)^{0.25} & \text{pour } 18 \leq We_g < 45 \\ 14.1(We_g - 12)^{-0.25} & \text{pour } 45 \leq We_g < 351 \\ 0.766(We_g - 12)^{0.25} & \text{pour } 351 \leq We_g < 2670 \\ 5 & \text{pour } We_g \geq 2670 \end{cases} \quad (3.51)$$

Le temps de rupture secondaire, τ_{rup} , est déduit du paramètre T , équation (3.51) :

$$\tau_{rup} = T \frac{d_{32}}{U_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3.52)$$

Avec U_{rel} la vitesse relative entre les phases. La valeur critique de la densité d'interface masique, $\tilde{\Omega}_c$, se base, elle aussi, sur le calcul d'un Weber, We_c :

$$\tilde{\Omega}_c = \frac{6\rho_g U_{rel}^2 \tilde{Y}_l}{\rho_l \sigma We_c} \quad (3.53)$$

Cette valeur du Weber critique s'obtient en appliquant le même raisonnement que Pilch and Erdman [135], c'est-à-dire fonction de la viscosité du liquide au-travers du nombre d'Ohnesorge :

$$We_c = 12(1 + 1.077Oh^{1.6}) \quad (3.54)$$

3.3.3.5. Destruction par évaporation

Le terme source, $\dot{\tilde{\Omega}}_{evap}$, représente les effets d'évaporation sur la densité d'interface. Lebas et al. [100, 101] ont utilisé un modèle basé sur la loi du d^2 pour le déterminer. Celui-ci relie la diminution de cette surface à la décroissance du rayon de la goutte uniquement dans la zone diluée du spray.

$$\dot{\tilde{\Omega}}_{evap} = -\frac{2\tilde{\Omega}^2}{3\tilde{Y}_l} \frac{\dot{m}_{evap}}{\pi d^2} \quad (3.55)$$

Sachant que \dot{m}_{evap} représente la quantité de masse évaporée de la goutte qui est estimée d'après les travaux de Abramzon and Sirignano [12].

3.3.4. Modèle de Chesnel

Les travaux de Chesnel [35], Chesnel et al. [36] s'inscrivent dans la continuité de ceux réalisés par Vallet et al. [173], Beau et al. [18, 19] et Lebas et al. [100, 101]. Le domaine d'étude ainsi que les applications sont toujours orientées vers le milieu automobile avec un jet diesel à haut nombre de Reynolds et Weber. L'objectif des travaux de Chesnel et al. [36] est de déterminer qualitativement et quantitativement l'atomisation du spray, dans un contexte LES. Pour cela, une équation de transport de densité d'interface est employée afin de récupérer les informations sous-mailles manquantes sur la topologie de l'écoulement. Le but de cette démarche est de déterminer le plus fidèlement possible la taille des gouttes produites dans le jet liquide à haute vitesse.

Le concept de densité d'interface, établi dans un contexte RANS, s'adapte bien aux simulations aux grandes échelles, LES. Le support du filtrage des équations de Navier-Stokes, $\bar{\Delta}$, est directement lié au volume de contrôle V de la densité d'interface, équation (3.1).

$$\bar{\Sigma} = \frac{S}{\bar{\Delta}^3} \quad (3.56)$$

Avec S la surface à l'intérieur de la cellule et $\bar{\Delta}$ la longueur caractéristique de la maille. La formulation du transport de cette quantité est similaire à celle utilisée par Vallet et al. [173], dans les modèles de spray en RANS, et celle étendue par Lebas et al. [100, 101] dans un contexte ELSA.

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\Sigma}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\Sigma} (\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma_\alpha}) \right) + \dot{\bar{\Sigma}} \quad (3.57)$$

Avec $\bar{\Sigma}(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma_\alpha})$, la représentation du glissement dans les approches RANS. Le choix de la vitesse de la densité d'interface, \bar{u}_{Γ_α} , dépend de la modélisation et de la configuration d'étude. En effet pour des simulations de gouttes, Iyer et al. [85] la considère égale à celle des gouttes, mais ce n'est pas systématiquement le cas, notamment pour des simulations de bulles. Pour des applications dans un milieu dense, Vallet et al. [173] ou encore Lebas et al. [100, 101] représente ce glissement par une loi de diffusion standard :

$$\bar{\Sigma}(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma_\alpha}) \simeq D_\Sigma \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_\alpha} \quad (3.58)$$

Dans le cadre du formalisme LES, Chesnel et al. [36] utilisent le modèle de diffusion de Smagorinsky [161] :

$$\bar{\Sigma}(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma_\alpha}) \simeq -2C_s \bar{\Delta}^2 |S| \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_\alpha} \quad (3.59)$$

L'ensemble des phénomènes pris en compte est décomposé en plusieurs contributions :

$$\dot{\bar{\Sigma}} = \dot{\bar{\Sigma}}_{int} + \dot{\bar{\Sigma}}_{evap} + \dot{\bar{\Sigma}}_{mel} \quad (3.60)$$

La première contribution, $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$, représente la production ou la destruction de surface induite par l'étirement, la turbulence et les interactions entre les structures liquides. Cela regroupe une multitude de phénomènes tels que l'action de l'écoulement gazeux sur l'interface, à-travers le cisaillement et les tourbillons générés. Les collisions entre structures liquides, peuvent représenter des fragmentations d'amas en gouttelettes mais aussi de potentielles coalescences. La modélisation de cette contribution est ardue puisqu'un ensemble de phénomènes est regroupé au sein d'un même terme dont les effets sont difficiles à classifier, surtout en zone dense.

La deuxième, $\dot{\bar{\Sigma}}_{evap}$, mentionne la destruction d'interface due à l'évaporation du liquide. Néanmoins, ce terme n'est pas pris en compte dans tous les travaux de Chesnel et al. [36] car les simulations se sont déroulées à froid.

Finalement, la dernière contribution, $\dot{\bar{\Sigma}}_{mel}$, représente la production d'interface provoquée par le mélange liquide/gaz présent dans la cellule courante. Ce terme, souvent assimilé à un terme d'initialisation, a été traité de manière particulière.

Dans l'absolu, pour reconstruire correctement la densité d'interface, la modélisation et l'emploi de tous les termes sources sont nécessaires. Néanmoins, les travaux de Chesnel et al. [36] ont proposé une nouvelle approche, propre aux simulations LES. En utilisant les informations partiellement reconstruites au sein des cellules, la densité d'interface, $\bar{\Sigma}$, est décomposée en une valeur moyenne, $\bar{\Sigma}_{min}$, et une composante fluctuante sous-maille, $\bar{\Sigma}'$.

$$\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}_{min} + \bar{\Sigma}' \quad (3.61)$$

Dans un contexte LES, chaque cellule possédant une valeur de fraction volumique \bar{Y}_l positive, contient une interface. Cette dernière est souvent reconstruite par des méthodes numériques qui approximent sa valeur, section 2.3.1.2. Or ce type de reconstruction, minimise la quantité de surface dans la maille et ainsi la densité d'interface, $\bar{\Sigma}_{min}$, par rapport à sa valeur réelle, $\bar{\Sigma}$. Pour

cette raison, une quantité complémentaire à $\overline{\Sigma}_{min}$ est nécessaire, $\overline{\Sigma}'$, afin de récupérer la densité d'interface exacte au sein de la maille, $\overline{\Sigma}$.

Néanmoins, l'avantage des simulations aux grandes échelles est l'accès à la composante moyenne de la densité d'interface, $\overline{\Sigma}_{min}$, directement mesurable au sein de la cellule. L'information topologique perdue lors du filtrage est représentée par $\overline{\Sigma}'$ tandis que l'information réelle recherchée est notée $\overline{\Sigma}$.

3.3.4.1. Densité d'interface résolue

Les simulations LES résolvent toutes les échelles de l'écoulement se situant au dessus d'une échelle de coupure. Ainsi, la diminution de cette dernière, soit la résolution d'échelles de plus en plus petites, fait tendre les simulations LES vers des DNS. De plus, lorsque la résolution de l'interface est suffisante, l'apport de la contribution sous-maille, $\overline{\Sigma}'$, devient négligeable. Cela signifie que dans certaines zones denses de l'écoulement, lorsque l'interface est correctement reconstruite, la densité d'interface minimale mesurable dans la cellule, $\overline{\Sigma}_{min}$, est très proche de la valeur réelle, $\overline{\Sigma}$.

La première des estimations de $\overline{\Sigma}_{min}$, serait la valeur de l'interface reconstruite directement mesurable dans la cellule. Néanmoins, Chesnel et al. [36] ont proposé une formulation de $\overline{\Sigma}_{min}$ à partir de la quantité de liquide présente dans la maille :

$$\overline{\Delta} \overline{\Sigma}_{min} = C \sqrt{\overline{Y}_l(1 - \overline{Y}_l)} \quad (3.62)$$

Avec $C = 2.4$, une constante déterminée au moyen de l'analyse de simulations d'une base de donnée simplifiée reliant surface et fraction volumique, d'après Chesnel et al. [36].

En utilisant la décomposition de l'équation (3.61) de $\overline{\Sigma}$ avec l'équation de transport initiale, (3.57), la résolution et le transport de la contribution sous maille, $\overline{\Sigma}'$, ne devraient contenir que le terme source des contributions internes $\dot{\overline{\Sigma}}_{int}$.

$$\frac{\partial \overline{\Sigma}'}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u}_i \overline{\Sigma}'}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\overline{\Sigma}' (\overline{u}_\alpha - \overline{u}_{\Gamma_\alpha}) \right) + \dot{\overline{\Sigma}}_{int} \quad (3.63)$$

L'avantage de cette formulation est de s'abstenir de modéliser et de résoudre le terme source problématique $\dot{\overline{\Sigma}}_{mel}$.

3.3.4.2. Production interne

Chesnel et al. [36] réutilisent la même formulation que Iyer and Abraham [84], Vallet et al. [173], Beau et al. [18, 19] ainsi que Lebas et al. [100, 101] pour modéliser le terme source $\dot{\overline{\Sigma}}_{int}$.

$$\dot{\overline{\Sigma}}_{int} = \frac{\overline{\Sigma}}{\tau_{eq}} \left(1 - \frac{\overline{\Sigma}}{\overline{\Sigma}_{eq}} \right) \quad (3.64)$$

Cette modélisation introduit une valeur d'équilibre pour la densité d'interface notée $\overline{\Sigma}_{eq}$ qui devrait être atteinte au bout d'un temps caractéristique τ_{eq} . De part leur contexte d'étude, jet Diesel avec de haut Reynolds et Weber, Chesnel et al. [36] font l'hypothèse d'activation de ce terme dès la zone dense de la simulation. Cela implique que la plupart des structures liquides se détachent et coalescent à cause de la turbulence induite par l'écoulement.

Le temps caractéristique turbulent τ_{eq} employé dans ce contexte est :

$$\frac{1}{\tau_{eq}} = |\overline{S}| = \sqrt{2 \overline{S}_{i,j} \overline{S}_{i,j}} \quad \text{avec} \quad \overline{S}_{i,j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.65)$$

Avec \overline{S} le tenseur des forces résolues. La même décomposition qu'à l'équation (3.61) est faites pour cette densité d'interface à l'équilibre.

$$\bar{\Sigma}_{eq} = \bar{\Sigma}_{eq \ min} + \bar{\Sigma}'_{eq} \quad (3.66)$$

La valeur de densité d'interface recherchée, $\bar{\Sigma}_{eq}$, est composée d'une contribution résolue et mesurable par la simulation LES, $\bar{\Sigma}_{eq \ min}$, et d'une contribution sous-maille qui doit être modélisée, $\bar{\Sigma}'_{eq}$.

Pour cela, cette dernière, $\bar{\Sigma}'_{eq}$, est reliée au calcul d'un Weber.

$$We_{eq} = \frac{\bar{\rho} \bar{k}}{\sigma \bar{\Sigma}'_{eq}} \quad (3.67)$$

Cette notion d'équilibre implique que les structures liquides émises sont stables. Physiquement, cela se traduit par une compensation des forces de tensions de surface et des forces aérodynamiques. La valeur de ce Weber est supposée de l'ordre de l'unité, $We_{eq} = 1$.

Cette définition peut impliquer des incohérences avec l'analyse de cellules pleines ou vides de liquide qui pourraient posséder un Weber non nul. Pour pallier ce problème un pré-facteur lié à la fraction volumique est ajouté :

$$We_{eq} = \bar{Y}_l(1 - \bar{Y}_l) \frac{\bar{\rho} \bar{k}}{\sigma \bar{\Sigma}'_{eq}} \quad (3.68)$$

Grâce à cette modélisation, l'expression finale de la densité d'interface à l'équilibre est obtenue, permettant de fermer le terme source $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$.

$$\bar{\Sigma}_{eq} = \bar{\Sigma}_{eq \ min} + \bar{Y}_l(1 - \bar{Y}_l) \frac{\bar{\rho} \bar{k}}{\sigma} \quad (3.69)$$

Deuxième partie

Outils numériques pour la simulation et l'analyse de l'atomisation assistée

Résolution directe des équations de Navier-Stokes diphasiques incompressibles avec le code DYJEAT

Dans ce chapitre, une présentation du code de DNS d'écoulements diphasiques DYJEAT est réalisée. Tout d'abord, le modèle physique reproduit est décrit avec ses principales hypothèses. Suite à cela, les méthodes de résolutions des équations de Navier-Stokes sont listées avec leurs couplages dans DYJEAT. Les conditions de saut ainsi que les techniques pour les prendre en compte sont présentées à la suite. Les conditions limites employées dans les futures simulations sont listées tandis qu'un mot sur l'intégration temporelle et sa condition de stabilité termine cette présentation de DYJEAT.

Sommaire

4.1. Contexte et origine	68
4.2. Modèle physique	68
4.2.1. Équations de Navier-Stokes incompressibles	68
4.2.2. Interface et conditions de saut	69
4.3. Résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles en diphasiques sur un maillage décentré	69
4.3.1. Maillage MAC	70
4.3.2. Méthode de projection dans la description monophasique	70
4.3.3. Traitement numérique	71
4.3.4. Méthode de suivi d'interfaces	72
4.3.4.1. Principe de la méthode LS	72
4.3.4.2. Principe de la méthode VOF	73
4.3.4.3. Principe de la méthode CLSVOF	74
4.4. Couplage avec les conditions de saut	77
4.4.1. Propriétés géométriques de l'interface	78
4.4.2. Méthode Ghost-Fluid	78
4.4.3. Saut de viscosité	81
4.5. Conditions aux limites	81
4.6. Intégration temporelle	81
4.7. Condition de stabilité temporelle	82
4.8. Conclusion	82

4.1. Contexte et origine

Ce chapitre présente succinctement le modèle physique ainsi que les méthodes numériques employées au sein du code DYJEAT dont l'objectif est de résoudre les équations de Navier-Stokes incompressibles pour les écoulements monophasiques et diphasiques.

Depuis sa création en 2007, ce code a profité de multiples développements pour gagner en flexibilité, en précision et robustesse. L'interface était initialement décrite par une méthode LS de Couderc [39], puis a été améliorée par le couplage CLSVOF (Coupled Level Set Volumn of Fluid) puis CMOM (Coupled Momentum) de Zuzio et al. [186]. Ce dernier réalisa une version avec une adaptation de maillage, Zuzio [184], et Marter-Lagrange [116] y ajouta des interfaces immergées pour modéliser des parois solides. Pour finir, au cours de cette thèse, un module indépendant de détection des structures liquides a été développé, venant enrichir ses options de simulations.

Les multiples configurations d'utilisation de ce code de calcul illustrent toute la précision et la robustesse de la méthode numérique employée : impact de gouttes surfondues (SLD) Xavier et al. [181], jet liquide cisailé, Zuzio et al. [186] et nappe liquide cisailée, Averseng et al. [15]. Peu de développements ont été ajoutés à DYJEAT durant cette thèse, mise à part la détection de structures liquides, c'est pourquoi ce code n'est présenté que succinctement par la suite. Les travaux de Couderc [39], Zuzio [184] et Xavier et al. [181] fournissent plus de détails sur les méthodes numériques employées dans DYJEAT, notamment pour l'algorithme de convection de la quantité de mouvement dans le cas de grand rapport de masse volumique (Marter-Lagrange [116], Zuzio et al. [186]) qui n'est pas abordé dans ce chapitre.

4.2. Modèle physique

4.2.1. Équations de Navier-Stokes incompressibles

Dans cette approche la matière est supposée continûment répartie, sous la condition d'un nombre de Knudsen faible ($Kn < 0.1$). Ainsi l'écoulement, possédant deux phases non miscibles, est utilisé tel un milieu fluide continu. Parmi ces deux phases, celle ayant la plus grande densité est désignée comme la phase liquide (associée à l'indice (.l) tandis que la plus légère est notée comme la phase gazeuse (indice (.g)). Ces deux fluides sont décrits par une approche eulérienne qui associe ses propriétés à des fonctions de l'espace et du temps (x, t).

Chaque élément fluide d'un écoulement respecte l'équation de conservation de sa masse suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho U) \quad (4.1)$$

Avec ρ la masse volumique du fluide et U le vecteur vitesse. Les fluides sont supposés incompressibles, ce qui implique une masse volumique constante et uniforme. L'équation de conservation de la masse se réduit donc à une divergence nulle du champ de vitesse.

$$\nabla \cdot U \quad (4.2)$$

Cette hypothèse d'incompressibilité simplifie l'expression de la conservation de quantité de mouvement qui s'écrit :

$$\rho \left(\frac{\partial U}{\partial t} + (U \cdot \nabla) U \right) = \nabla \cdot T + f \quad (4.3)$$

L'ensemble des forces volumiques et le tenseur des contraintes surfaciques sont respectivement notées f et T . Ce dernier est composé des forces de pressions et des contraintes liées à la viscosité.

$$T = -PI + D \quad (4.4)$$

Sachant que la matrice identité est notée I , la pression P et le tenseur des contraintes visqueuses

D . Les fluides sont supposés Newtoniens, ce qui permet d'exprimer ce dernier en fonction des déformations ainsi que de la viscosité dynamique μ .

$$D = \mu (\nabla U + (\nabla U)^\top) \quad (4.5)$$

Avec $(\cdot)^\top$ qui désigne l'opération transposée.

4.2.2. Interface et conditions de saut

Les équations de conservation de la masse et de conservation de la quantité de mouvement régissent les mouvements d'un fluide mais ne tiennent pas compte du caractère diphasique de l'écoulement. Pour réaliser cela, une modélisation doit être utilisée dans la zone de séparation des deux fluides. Dans le cas de fluides non miscibles, cette zone est d'une épaisseur de l'ordre de quelques molécules et donc assimilable à une surface, désignée par la suite comme interface. Au-travers de cette dernière, les propriétés des fluides changent brusquement et cela se traduit par une modélisation sous la forme de conditions de saut.

$$[P] = \sigma \kappa = \sigma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (4.6)$$

$[P]$ désigne le saut de pression à l'interface entre les deux fluides, σ désigne la tension de surface et κ la courbure de l'interface estimée à partir des deux rayons de courbures r_1 et r_2 .

La dynamique complète des conditions de sauts des contraintes visqueuses est résumée dans les équations (4.7) et (4.8) avec n la normale et t la tangente à l'interface.

$$n \cdot [T] \cdot n = \sigma \kappa \quad (4.7)$$

$$t \cdot [T] \cdot n = 0 \quad (4.8)$$

Ces relations traduisent une continuité de la vitesse tangentielle à l'interface mais un saut dans sa dérivée. De plus, en l'absence de changement de phase, la composante normale de la vitesse (liquide ou gaz) est égale à la vitesse normale de l'interface. Cela signifie une continuité de la composante normale de la vitesse à travers l'interface, Figure 4.1.

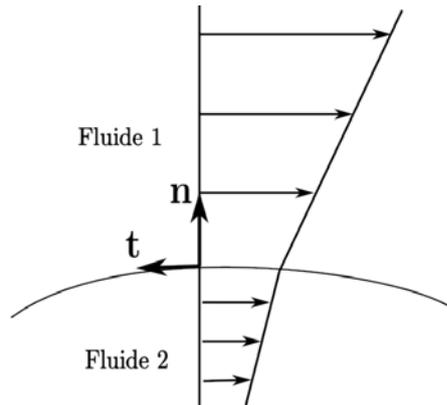


FIGURE 4.1. – Profils de vitesse des fluides résultant du respect de l'équilibre des forces visqueuses, continus à l'interface mais de dérivées discontinues.

4.3. Résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles en diphasiques sur un maillage décentré

Les méthodes numériques retenues pour décrire le modèle physique précédemment décrit sont présentées par la suite. Pour simplifier les notations, les développements sont présentés sur un

domaine à deux dimensions et peuvent être prolongés dans la troisième.

En premier lieu, le domaine de calcul et le type de maillage employé sont présentés. S'en suit la méthode de résolution dans le cas monophasique avec la description des conditions limites utilisées. Pour finir, les méthodes de prise en compte de l'interface sont décrites avec son application dans le code DYJEAT.

4.3.1. Maillage MAC

Le domaine de calcul est un domaine rectangulaire, discrétisé selon un maillage cartésien structuré et régulier. La pression est calculée au centre des mailles tandis que les vitesses sont définies sur les faces des cellules, Figure 4.2.

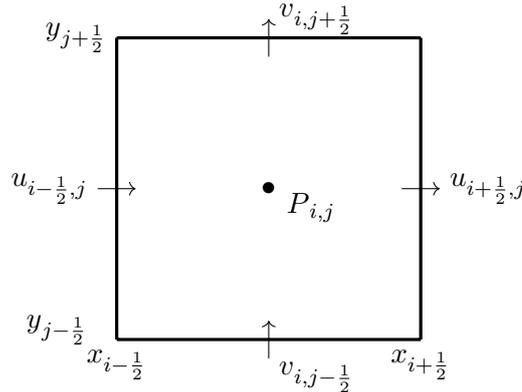


FIGURE 4.2. – Répartition de la pression et des composantes de vitesses sur une cellule d'un maillage de type MAC.

Le maillage est composé d'un nombre n_x, n_y de mailles carrées dans les directions x, y , avec des pas constants et égaux $\Delta x, \Delta y$.

$$\forall i \in \{1, \dots, n_x\}, \quad \Delta = \Delta x = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} \quad (4.9)$$

$$\forall j \in \{1, \dots, n_y\}, \quad \Delta = \Delta y = y_{j+\frac{1}{2}} - y_{j-\frac{1}{2}} \quad (4.10)$$

4.3.2. Méthode de projection dans la description monophasique

Le couplage entre les variables de pression et de vitesse, au-travers de la condition d'incompressibilité, complexifie l'obtention d'une solution discrète des équations de Navier-Stokes. Parmi les nombreuses méthodes existantes pour résoudre ce problème se trouvent celles de projections, initialement proposées par Chorin [37] et Temam [168]. Cette dernière consiste à résoudre successivement des systèmes d'équations découplés (vis à vis de la pression et de la vitesse) respectant la condition de divergence nulle du champ de vitesse.

Cette méthode repose sur la décomposition de Hodge qui stipule que n'importe quel champ de vecteur U peut être décomposé en un champ U_{div} à divergence nulle ainsi qu'un champ irrotationnel $\nabla\Psi$

$$U = U_{\text{div}} + \nabla\Psi \quad (4.11)$$

Ainsi en appliquant l'opération de divergence à l'équation (4.11), l'expression devient :

$$\nabla \cdot U = \Delta\Psi \quad (4.12)$$

L'équation (4.12) exprime une équation de Poisson pour le potentiel Ψ . La méthode de projection de Chorin [37] exploite cette décomposition en séparant en deux la résolution de l'équation de la quantité de mouvement pour découpler les variables vitesses et pression.

Étape de prédiction

La première étape, dite prédictive, estime une vitesse intermédiaire, U^* , à partir de l'équation (4.3) sans le terme de pression.

$$U^* = U^n + \Delta t^n \left(-(U^n \cdot \nabla)U^n + \frac{\mu}{\rho} \nabla \cdot (\nabla U^n + (\nabla U^n)^\top) \right) \quad (4.13)$$

Calcul du terme de pression

La deuxième étape détermine le terme pression à partir de cette vitesse intermédiaire :

$$\frac{1}{\rho} \Delta P^{n+1} = \frac{\nabla \cdot U^*}{\Delta t^n} \quad (4.14)$$

Correction de la vitesse

Enfin, l'estimation du champ de vitesse au pas de temps suivant s'effectue en retranchant le gradient de pression à la vitesse intermédiaire.

$$U^{n+1} = U^* - \frac{\Delta t^n}{\rho} \nabla P^{n+1} \quad (4.15)$$

4.3.3. Traitement numérique

Étape de prédiction

$$u_{i+\frac{1}{2},j}^* = u_{i+\frac{1}{2},j}^n + \Delta t^n \left(- \left(u^n \frac{\partial u^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial y^2} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right) \quad (4.16)$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2}}^* = v_{i,j+\frac{1}{2}}^n + \Delta t^n \left(- \left(u^n \frac{\partial v^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial v^n}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^n}{\partial y^2} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right) \quad (4.17)$$

- Discrétisation du terme convectif $(U^n \cdot \nabla)U^n$

Le terme $\left(u^n \frac{\partial u^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j}$ présent dans l'équation (4.16) requiert l'évaluation discrète des dérivées partielles aux points d'évaluation de la vitesse. Le calcul de ces dernières est réalisé de manière décentrée au centre des cellules et suivant le sens de l'écoulement pour assurer la stabilité des simulations.

$$\left(\frac{\partial u^n}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} \left(\frac{\partial u^n}{\partial x} \right)_{i,j} & \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j}^n > 0 \\ \left(\frac{\partial u^n}{\partial x} \right)_{i+1,j} & \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j}^n \leq 0 \end{cases} \quad (4.18)$$

$$\left(\frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} \left(\frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} & \text{si } v_{i+\frac{1}{2},j}^n > 0 \\ \left(\frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} & \text{si } v_{i+\frac{1}{2},j}^n \leq 0 \end{cases} \quad (4.19)$$

Toutes ces dérivées décentrées sont estimées au moyen d'un schéma WENO5 de Shu [159] qui combine plusieurs potentielles discrétisations basées sur un stencil de six points. Plus d'informations sur leurs constructions et évaluations sont disponibles dans les thèses de Marter-Lagrange [116] et Xavier [180].

- Discrétisation du terme visqueux $\nabla \cdot (\nabla U^n + (\nabla U^n)^\top)$

Le terme des contributions visqueuses n'est discrétisé qu'avec un schéma centré d'ordre deux puisque les dérivées secondes sont calculées sur les faces où les vitesses sont définies.

$$\left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial y^2} \right)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{u_{i+\frac{3}{2},j}^n - 2u_{i+\frac{1}{2},j}^n + u_{i-\frac{1}{2},j}^n}{\Delta^2} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1}^n - 2u_{i+\frac{1}{2},j}^n + u_{i+\frac{1}{2},j-1}^n}{\Delta^2} \quad (4.20)$$

$$\left(\frac{\partial^2 v^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^n}{\partial y^2} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}}^n - 2v_{i,j+\frac{1}{2}}^n + v_{i-1,j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta^2} + \frac{v_{i,j+\frac{3}{2}}^n - 2v_{i,j+\frac{1}{2}}^n + v_{i,j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta^2} \quad (4.21)$$

Calcul du terme de pression

$$\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right)_{i,j} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j} \right) = \frac{1}{\Delta t^n} \left(\frac{\partial u^\star}{\partial x} + \frac{\partial v^\star}{\partial y} \right)_{i,j} \quad (4.22)$$

La discrétisation du terme de pression emploie un schéma centré d'ordre deux utilisant un stencil à cinq points.

$$\frac{1}{\rho} \left(\frac{P_{i+1,j}^{n+1} - 2P_{i,j}^{n+1} + P_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta^2} + \frac{P_{i,j+1}^{n+1} - 2P_{i,j}^{n+1} + P_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta^2} \right) = \frac{1}{\Delta t^n} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j}^\star - u_{i-\frac{1}{2},j}^\star}{\Delta} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}^\star - v_{i,j-\frac{1}{2}}^\star}{\Delta} \right) \quad (4.23)$$

La matrice obtenue est une matrice creuse à 5 bandes (7 dans le cas 3D). La résolution de ce système linéaire est effectué par une méthode de gradient conjugué préconditionné par une méthode multigrille, (cycle en V). Plus de détails de cette méthode sont disponibles dans les travaux de Couderc [39].

Correction de la vitesse

L'obtention de la pression aux centres des mailles permet de calculer facilement la vitesse corrigée.

$$u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = u_{i+\frac{1}{2},j}^\star - \frac{\Delta t^n}{\rho} \left(\frac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta} \right) \quad (4.24)$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = v_{i,j+\frac{1}{2}}^\star - \frac{\Delta t^n}{\rho} \left(\frac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta} \right) \quad (4.25)$$

4.3.4. Méthode de suivi d'interfaces

Parmi les méthodes capables de prendre en compte la géométrie d'une interface se dégagent deux principales familles. La première s'emploie à capturer l'interface au-travers d'une description Eulérienne (Level-Set, Volume of Fluid) de cette dernière tandis que la seconde la traque de manière Lagrangienne (Front-Tracking). Déjà introduites dans les sections 2.3.1.2 et 2.3.1.1 les méthodes de suivi d'interface sont brièvement détaillées par la suite puisque le code DYJEAT utilise un couplage du VOF et de LS, Sussman and Puckett [166].

4.3.4.1. Principe de la méthode LS

La méthode LS de Osher and R.Fedkiw [130] repose sur une fonction ϕ qui représente en tout point la distance signée à l'interface. L'interface est désignée comme l'iso-contour 0 de cette

fonction tandis que ses valeurs positives, négatives, désignent respectivement le liquide et le gaz. L'interface, soumise au champ de vitesse, est advectée de la manière suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \cdot \nabla \phi = 0 \quad (4.26)$$

Toutefois, lors de son advection, les forts gradients de vitesses altèrent l'advection des différents iso-contours de cette fonction. Sussman et al. [167] proposent un algorithme de redistanciation pour réinitialiser la LS après son advection. Ce dernier corrige les iso-contours de la LS à partir de l'interface, l'iso-contour 0. Pour réaliser cela, un champ temporaire ψ est employé évoluant suivant un temps fictif τ .

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \text{sign}(\phi(x, t)) (1 - \|\nabla \psi\|) \\ \psi(x, \tau = 0) = \phi(x, t) \end{cases} \quad (4.27)$$

Lorsque l'état stationnaire de la fonction ψ est atteint ($\tau \rightarrow \infty$), cette dernière est devenue hyper-régulière $\|\psi\| = 1$. Ainsi après sa convergence, le champ ψ représente bien l'ensemble des nouveaux iso-contours de cette fonction distance, $\phi(x, t) = \psi(x, \tau \rightarrow \infty)$, Figure 4.3.

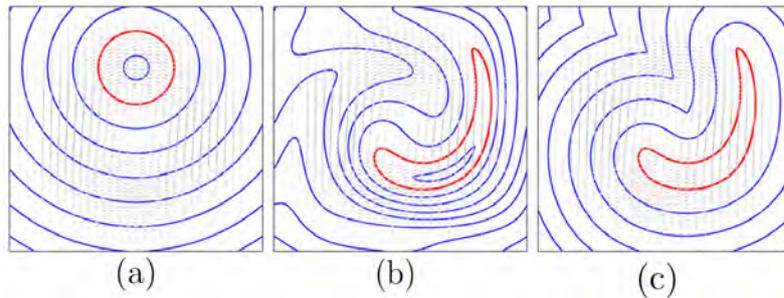


FIGURE 4.3. – Représentation du principe de la redistanciation : (a) Iso-contours avant advection (b) Iso-contours après advection, la propriété de fonction distance est perdue (c) Iso-contours rendus parallèles grâce à l'algorithme de redistanciation, Xavier [180], Marter-Lagrange [116]

Le principal avantage de la LS concerne le calcul des propriétés géométriques de l'interface qui sont aisément accessibles. La normale de l'interface, n , ainsi que le champ de courbure, κ , s'obtiennent de la façon suivante :

$$\begin{aligned} n &= \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \\ \kappa &= \nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \end{aligned} \quad (4.28)$$

Toutefois cette méthode de capture d'interface présente des inconvénients bien connus tels que la perte de masse dans les zones sous-résolues ou à forte courbure due à la résolution numérique de l'équation de redistanciation.

4.3.4.2. Principe de la méthode VOF

La méthode VOF de Hirt and Nichols [80] définit dans chaque cellule du domaine la fraction volumique de chaque fluide. Cette fonction désignée comme fonction couleur, C , est bornée entre 0 (cellule entièrement gazeuse) et 1 (cellule entièrement liquide).

Ainsi, la méthode VOF utilise et transporte de manière similaire à la LS la fonction couleur C .

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \cdot \nabla C = 0 \quad (4.29)$$

Plusieurs possibilités existent pour résoudre cette équation de transport. La première, dite "algébrique", consiste à une discrétisation par approche aux différences finies ou volumes finis de la fonction couleur. Étant donné que celle-ci présente une discontinuité, cette approche conduit naturellement à une perte de la notion d'interface "nette" en diffusant cette fonction couleur sur plusieurs cellules. Cette possibilité regroupe toutes les résolutions par VOF algébrique sous le nom de méthode à interface diffuse. La seconde possibilité consiste à reconstruire une interface dans chaque cellule mixte de façon géométrique et regroupe toutes les méthodes à interface nette.

L'avantage de la méthode VOF est d'être équivalente à la conservation de la masse, de par sa formulation. Toutefois, la principale difficulté pour la famille des résolutions de type interface nette, consiste à déterminer avec précision les propriétés de l'interface, géométrie générale, courbure, normale, nécessaire à la prise en compte de la physique à l'interface.

4.3.4.3. Principe de la méthode CLSVOF

Cette méthode s'inspire de Sussman and Puckett [166] en combinant les avantages des méthodes LS (calcul aisé de la normale et de la courbure) et VOF (conservation de la masse) et en s'affranchissant de leurs inconvénients respectifs.

Le principe du déroulement de cette méthode, implémentée dans DYJEAT, suit les étapes suivantes :

- Reconstruction PLIC de l'interface, noté au ϕ^R au temps n , qui est obtenue à partir de la fonction LS ϕ^n et des estimations des propriétés de l'interface.
- Résolution des deux équations de transport (fonctions LS et VOF), pour simuler le déplacement de l'interface.
- Redistance de la LS ϕ^{n+1} .
- Correction de la position de l'iso-0 de LS afin de conserver localement la masse.

Reconstruction de l'interface

Plusieurs types de reconstructions de l'interface existent, mais les deux plus courantes sont la reconstruction SLIC (Simple Linear Interpolation Calculation) de Noh and Woodward [123] pour sa simplicité de mise en oeuvre et la reconstruction PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) de Youngs [182]. La première ne reconstruit que des flux horizontaux ou verticaux et peut être considérée comme une première approximation. La seconde modélise l'interface tel un plan et permet de reconstruire des plans verticaux, horizontaux ou inclinés, grâce à un calcul de normales, Figure 4.5. Dans tous les cas, la reconstruction de l'interface est discontinue.

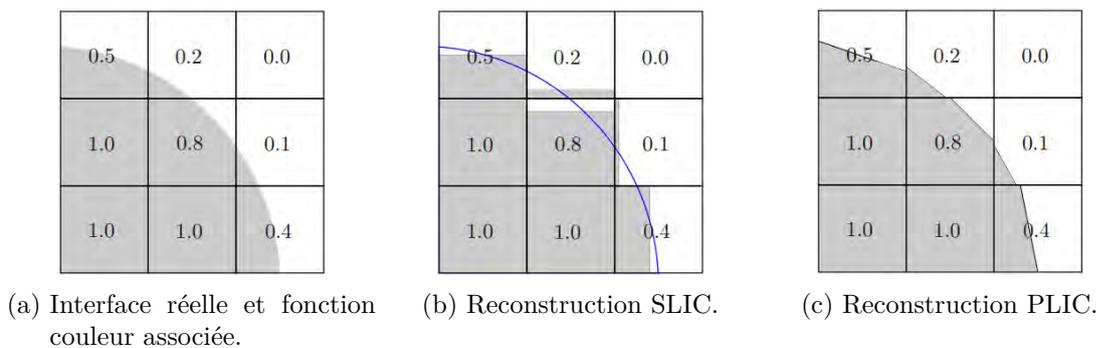


FIGURE 4.4. – Représentation de reconstructions de l'interface, Zuzio [184].

La procédure de reconstruction PLIC d'une cellule d'un maillage peut être résumée par les étapes suivantes :

- Calcul d'une fonction LS reconstruite, notée ϕ^R représentative de l'interface (une droite en 2D ou un plan en 3D). Cela se traduit en 2D par la détermination des coefficients a , b et c de la droite $ax + by + c = 0$ décrivant l'interface dans la cellule. Les coefficients a et b composent la normale obtenue après normalisation tandis que c représente la distance entre l'origine du repère local et l'interface.
- Estimation du volume liquide interne à la cellule, notée C^R , en fonction de la LS reconstruite ϕ^R . Pour cela, la librairie VOFTools de Lopez and Hernández [105] est employée. Correction, si nécessaire, du volume interne de la cellule C^R par rapport au volume réel C afin d'assurer la conservation de la masse. Pour cela, un ajustement du coefficient de l'équation de la droite est effectué pour garantir $C^R = C$.

Plus de détails concernant ces différentes étapes sont disponibles dans les travaux de Ménard [120] et Xavier [180].

Résolution des deux équations de transports

Les équations de transport de la LS (ϕ) et du VOF (C) sont colocalisées avec le champ de pression et résolues conjointement.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \cdot \nabla C = 0 \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \cdot \nabla \phi = 0 \quad (4.31)$$

- Transports directionnels

Pour cela, la méthodologie employée résout le transport de ces quantités direction par direction (operator splitting), Sussman and Puckett [166]. Le principe est de découper le transport de l'interface en plusieurs sous-étapes de transport monodirectionnel. Par exemple, en 2D, la fonction VOF (C) ou la fonction LS (ϕ) est advectée dans la direction x puis dans la direction y . Le principal avantage de cette méthode, en plus d'être précise à l'ordre deux, est d'être facile à implémenter.

Les équations de transport sont utilisées sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} - (\nabla \cdot U)C &= -\nabla \cdot (UC) \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} - (\nabla \cdot U)\phi &= -\nabla \cdot (U\phi) \end{aligned} \quad (4.32)$$

Bien que l'hypothèse incompressible implique que $\nabla \cdot U$ soit nul, ce dernier existe et doit être conservé dans cette approche directionnelle. Dans la suite, ce terme est discrétisé de façon implicite, tandis que le second l'est de manière explicite.

Un exemple de cette approche est présenté ci-dessous, en ne s'intéressant qu'à la direction x de l'équation (4.32). La variable ξ est représentative de la fonction LS (ϕ) ou VOF (C).

$$\frac{\xi_{i,j}^1 - \xi_{i,j}^n}{\Delta t_s} - \frac{u_{i+\frac{1}{2},j}^n - u_{i-\frac{1}{2},j}^n}{\Delta} \xi_{i,j}^1 = -\frac{G_{i+\frac{1}{2},j}^n - G_{i-\frac{1}{2},j}^n}{\Delta} \quad (4.33)$$

Le terme ξ^1 est une première prédiction de ξ suite à l'advection dans la direction x pour l'intervalle de temps Δt_s (différent de $t^{n+1} - t^n$). Le terme G^n représente le flux, en formulation volume fini, associé au second membre de l'équation (4.32). La première prédiction de ξ dans la direction x peut donc s'exprimer :

$$\xi^1 = \frac{\xi_{i,j}^n + \frac{\Delta t_s}{\Delta} \left(G_{i+\frac{1}{2},j}^n - G_{i-\frac{1}{2},j}^n \right)}{1 - \frac{\Delta t_s}{\Delta} \left(u_{i+\frac{1}{2},j}^n - u_{i-\frac{1}{2},j}^n \right)} = P_x(\xi^n, G^n) \quad (4.34)$$

Cette méthode de prédiction est transposable dans les autres directions y et z pour obtenir la prédiction finale dans le cas 3D.

$$\begin{aligned} \xi^1 &= P_x(\xi^n, G^n) & \Delta t_s &= \Delta t/2 \\ \xi^2 &= P_y(\xi^1, G^1) & \Delta t_s &= \Delta t/2 \\ \xi^3 &= P_z(\xi^2, G^2) \quad \text{avec} & \Delta t_s &= \Delta \\ \xi^4 &= P_y(\xi^3, G^3) & \Delta t_s &= \Delta t/2 \\ \xi^5 &= P_x(\xi^4, G^4) & \Delta t_s &= \Delta t/2 \end{aligned} \quad (4.35)$$

La valeur finale ξ^{n+1} est calculée à partir de l'ensemble des prédictions $(\xi^1, \xi^2, \xi^3, \xi^4, \xi^5)$ et du champ de vitesse :

$$\begin{aligned} \xi_{i,j}^{n+1} &= \xi^5 - \frac{\Delta t}{\Delta} \frac{\xi^1 + \xi^5}{2} \left(u_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^n \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta} \frac{\xi^2 + \xi^4}{2} \left(v_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - v_{i,j-\frac{1}{2},k}^n \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta} \xi^3 \left(w_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \right) \end{aligned} \quad (4.36)$$

Enfin une permutation dans l'ordre de résolution de ces directions pour les prochains pas de temps, permet d'augmenter l'ordre de précision de cette méthode, Strang [165].

- Calcul des flux de la LS (ϕ)

Lorsque $\xi = \phi$, les flux G de la LS sont estimés grâce aux extrapolations de cette dernière aux facettes, Griebel and Klitz [70]. Le flux $G_{i+\frac{1}{2},j}^n$ dans la direction x sur la face droite est estimé de la manière suivante :

$$G_{i+\frac{1}{2},j}^n = u_{i+\frac{1}{2},j}^n \phi_{i+\frac{1}{2},j}^n \quad (4.37)$$

$$\phi_{i+\frac{1}{2}}^n = \phi_{i,j}^n + \frac{\Delta}{2} \begin{cases} \left(1 - u_{i+\frac{1}{2},j}^n \frac{\Delta t}{\Delta} \frac{\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i-1,j}^n}{2\Delta} \right) & \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j}^n > 0 \\ \left(1 + u_{i+\frac{1}{2},j}^n \frac{\Delta t}{\Delta} \frac{\phi_{i+2,j}^n - \phi_{i,j}^n}{2\Delta} \right) & \text{si } u_{i+\frac{1}{2},j}^n < 0 \end{cases} \quad (4.38)$$

- Calcul des flux du VOF (C)

Dans le cadre du transport d'une interface nette (sans diffusion), le calcul des flux de VOF est réalisé de manière géométrique. Pour cela, l'interface est reconstruite géométriquement à l'aide de la librairie VOFTools de Lopez and Hernández [105] et en suivant les étapes citées précédemment. Ainsi, le flux géométrique de VOF traversant la face Est d'une cellule est illustré Figure 4.5.

La portion de volume entrant ou sortant de la cellule côté Est est estimée grâce à la vitesse sur la face $u_{i+\frac{1}{2},j}$ pendant Δt_s . Ce dernier est égal à $|u_{i+\frac{1}{2},j}| \Delta t_s \Delta$ dont seule la partie liquide est prise en compte avec la librairie VOFTools (*VOL*). Le flux de la fonction VOF (C) est défini de la manière suivante :

$$G_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{VOL}{|u_{i+\frac{1}{2},j}| \Delta t_s \Delta} u_{i+\frac{1}{2},j} \quad (4.39)$$

Redistance de la fonction LS

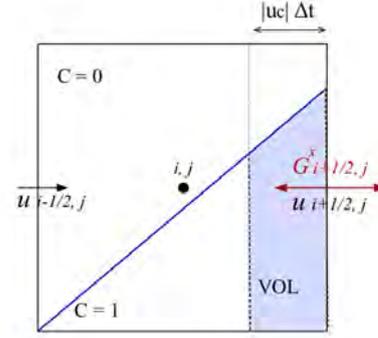


FIGURE 4.5. – Calcul géométrique du flux $G_{i+\frac{1}{2},j}$ sur la face Est de la cellule. L'interface reconstruite est représentée par la ligne continue bleue la cellule, Zuzio et al. [186].

La fonction LS (ϕ) ne représente plus correctement l'interface suite à l'opération d'advection et de sa correction par la fonction VOF (C) lors de la reconstruction de l'interface. Pour corriger cela, la fonction ϕ^{n+1} est soumise à l'opération de redistance, équation (4.31). Plus de détails sur cette opération sont disponibles dans les travaux de Couderc [39].

4.4. Couplage avec les conditions de saut

Pour rappel, l'ensemble des conditions de sauts décrites dans la section 4.2.2 peuvent s'exprimer sous la forme :

$$[P] - n \cdot [\mu (\nabla U + (\nabla U)^T)] \cdot n = \sigma \kappa \quad (4.40)$$

$$t \cdot [\mu (\nabla U + (\nabla U)^T)] \cdot n = 0 \quad (4.41)$$

$$[U] = 0 \quad (4.42)$$

La méthode Ghost-Fluid de Gibou et al. [64] permet d'appliquer des conditions de sauts à travers une interface avec une précision sous-maille et de manière explicite. Pour cela, les discontinuités des propriétés physiques, les différentes inconnues ainsi que leurs dérivées sont évaluées explicitement dans chaque direction.

Pour simplifier les notations, un cas 2D est conservé avec le vecteur vitesse $U = (u, v)$ et le vecteur normal $n = (n_x, n_y)$.

Le terme de diffusion de l'équation (4.40) peut s'écrire sous la forme :

$$n \cdot (\nabla U + \nabla U^T) = \begin{pmatrix} \nabla u \cdot n \\ \nabla v \cdot n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n_y \frac{\partial v}{\partial x} - n_x \frac{\partial u}{\partial y} \\ n_x \frac{\partial u}{\partial y} - n_y \frac{\partial v}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

Ce qui donne :

$$n \cdot (\nabla U + (\nabla U)^T) \cdot n = \begin{pmatrix} \nabla u \cdot n \\ \nabla v \cdot n \end{pmatrix} \cdot n \quad (4.44)$$

Sachant cela, la contrainte normale, équation (4.40), peut s'exprimer sous la forme :

$$[P] - \left[2\mu \begin{pmatrix} \nabla u \cdot n \\ \nabla v \cdot n \end{pmatrix} \right] \cdot n = \sigma \kappa \quad (4.45)$$

Sous l'hypothèse d'incompressibilité des fluides, Kang et al. [88] démontrent que :

$$\left[\begin{array}{c} (\nabla u \cdot n) \\ (\nabla v \cdot n) \end{array} \cdot n \right] = 0 \quad (4.46)$$

Ce qui simplifie l'obtention du saut de pression :

$$[P] - [2\mu] \left(\begin{array}{c} \nabla u \cdot n \\ \nabla v \cdot n \end{array} \right) \cdot n = \sigma \kappa \quad (4.47)$$

Ce résultat est facile à implémenter dans le code dès que la direction normale est calculée. En effet, de cette manière, les discontinuités sur la pression et la viscosité peuvent être appliquées de manière indépendante.

4.4.1. Propriétés géométriques de l'interface

La fonction LS a pour objectif de décrire fidèlement les propriétés géométriques de l'interface, notamment grâce à sa reconstruction PLIC basée sur le VOF. Grâce à cette dernière, la normale n ainsi que la courbure κ sont accessibles beaucoup plus aisément qu'avec le VOF seul.

$$n = \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \quad \kappa = \nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \quad (4.48)$$

Dans un contexte simplifié 2D, la détermination de la courbure κ s'obtient grâce à la divergence du gradient de la fonction LS (ϕ) :

$$\nabla \cdot (\nabla \phi) = 2\phi_x \phi_y \phi_{xy} - \phi_x^2 \phi_{yy} - \phi_y^2 \phi_{xx} \quad (4.49)$$

La dérivée première et seconde peuvent être discrétisées avec un schéma centré d'ordre deux comme suit :

$$\begin{aligned} \phi_x &= \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta} & \phi_{xx} &= \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j}}{\Delta^2} \\ \phi_y &= \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta} & \phi_{yy} &= \frac{\phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j}}{\Delta^2} \\ \phi_{xy} &= \frac{\phi_{i+1,j+1} + \phi_{i-1,j-1} - \phi_{i-1,j+1} + \phi_{i+1,j-1}}{4\Delta^2} \end{aligned} \quad (4.50)$$

Le dénominateur $\|\nabla \phi\|$ présent dans l'équation (4.52) s'exprime de la manière suivante :

$$\|\nabla \phi\| = \left(\phi_x^2 + \phi_y^2 \right)^{\frac{3}{2}} \quad (4.51)$$

D'autre part, si ce terme est nul, les dérivés sont estimées avec un schéma décentré d'ordre un.

4.4.2. Méthode Ghost-Fluid

Lors de l'étape de projection, plusieurs termes discrétisés de part et d'autre de l'interface subissent des sauts de valeur. La méthode Ghost-Fluid de Gibou et al. [64] permet de les prendre en compte en utilisant un domaine fictif de discrétisation qui prolonge continûment la valeur de la solution à travers l'interface.

Cette méthode, implémentée dans DYJEAT, est détaillée dans les travaux de Couderc [39]. Pour cette raison, seul le principe général ainsi que les principaux résultats sont rappelés par la suite.

Dans un domaine simplifié 1D, une interface liquide/gaz se situe entre les points x_i et x_{i+1} avec la répartition liquide à gauche et gaz à droite. La solution recherchée est alors discontinue entre ces deux points. L'objectif de cette méthode est d'obtenir les valeurs des dérivées de la solution au point proche de l'interface. Pour cela, des points fantômes prolongés continûment depuis leur champ de départ, sont rajoutés de l'autre côté de l'interface afin d'étendre le stencil de discrétisation.

Pour réaliser cela, la fonction LS (ϕ) est employée afin d'approcher au mieux les valeurs fantômes. Le principe de la méthode Ghost-Fluid est illustrée sur la résolution de l'équation de Poisson à coefficients variables, équation (4.52). Cet exemple permet de traiter une discontinuité sur une variable (analogue à la pression) et également sur la dérivée d'une variable (analogue aux dérivées tangentielles de la vitesse).

Les deux domaines fluides sont notés Ω_1 et Ω_2 tandis que $u^{(1)}$ et $u^{(2)}$ sont les vitesses de l'écoulement dans leurs domaines respectifs.

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left(\beta(x) \frac{\partial u(x)}{\partial x} \right) = f(x) \\ [u]_{\Gamma} = u^{(2)} - u^{(1)} = a(x) \\ \left[\beta(x) \frac{\partial u(x)}{\partial x} \right]_{\Gamma} = \left(\beta(x) \frac{\partial u(x)}{\partial x} \right)^{(2)} - \left(\beta(x) \frac{\partial u(x)}{\partial x} \right)^{(1)} = b(x) \end{cases} \quad x \in \Gamma \quad (4.52)$$

Discontinuité C^0

Cette configuration se limite au cas où $b(x) = 0$ et $a(x) \neq 0$, Gibou et al. [64]. L'imposition des conditions de sauts implique une imposition d'une condition de bord correcte dans l'équation de pression. La discrétisation standard de cette équation au point x_i est donnée par :

$$\frac{\beta_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta} \right) - \beta_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta} \right)}{\Delta} = f_i \quad (4.53)$$

Les valeurs fantômes sont obtenues d'après la Figure 4.6 :

$$\begin{cases} u_i^{(2)} = u_i^G = u_i^{(1)} + a(x_I) \\ u_{i+1}^{(1)} = u_{i+1}^G = u_{i+1}^{(2)} - a(x_I) \end{cases} \quad (4.54)$$

Dans ce cas de figure, les développements successifs permettent d'obtenir la discrétisation finale :

$$\frac{\hat{\beta} \left(\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta} \right) - \beta_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta} \right)}{\Delta} = f_i + \frac{a(x_I)}{\Delta^2} \hat{\beta} \quad (4.55)$$

Avec $\hat{\beta}$ est une valeur estimée en fonction de celles de β en $x = x_I$.

$$\hat{\beta} = \frac{\beta_{i+1}\beta_i}{\beta_{i+1}\theta + \beta_i(1-\theta)} \quad (4.56)$$

Sachant que θ est obtenue à partir de la LS (ϕ) :

$$\theta = \frac{|\phi_i|}{|\phi_{i+1}| + |\phi_i|} \quad (4.57)$$

D'autre part, la valeur du saut $a(x_I)$ et la valeur de $\hat{\beta}$ peuvent être obtenues grâce à une interpolation des valeurs aux points voisins donnée par :

$$a(x_I) = \frac{a_i|\phi_{i+1}| + a_{i+1}|\phi_i|}{|\phi_{i+1}| + |\phi_i|} \quad (4.58)$$

Discontinuité C^1

Cette configuration se limite au cas où $b(x) \neq 0$ et $a(x) = 0$, Figure 4.7. La solution u du système d'équation (4.52) est continue à travers l'interface mais pas sa dérivée. Cette fois-ci, ce cas de figure se transpose à celui rencontré pour les termes visqueux, $\mu/\rho(\nabla \cdot U + (\nabla \cdot U)^T)$

Dans cette configuration, la condition de saut s'écrit :

$$\frac{\beta_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta} \right) - \beta_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta} \right)}{\Delta} = f_i \quad (4.59)$$

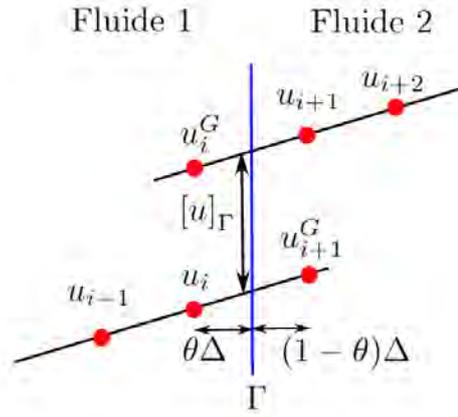


FIGURE 4.6. – Représentation de la méthode Ghost-Fluid en une dimension dans le cas d’une discontinuité sur la variable, Marter-Lagrange [116]

Sachant que u_I est la vitesse définie au point x_I :

$$u_I = \frac{\beta_{i+1}u_{i+1}\theta + \beta_i u_i(1-\theta) - b(x_I)\theta(1-\theta)\Delta}{\beta_{i+1}\theta + \beta_{i-\frac{1}{2}}(1-\theta)} \quad (4.60)$$

Dans ce cas de figure, les développements successifs renseignent la discrétisation finale :

$$\frac{\hat{\beta} \left(\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta} \right) - \beta_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta} \right)}{\Delta} = f_i + \frac{b(x_I)(1-\theta)}{\beta_{i+1}} \hat{\beta} \quad (4.61)$$

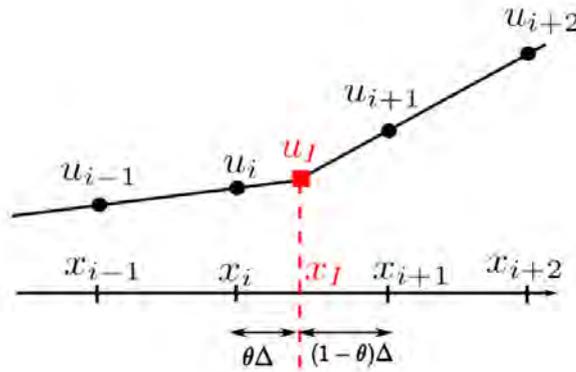


FIGURE 4.7. – Représentation de la méthode Ghost-Fluid en une dimension dans le cas d’une discontinuité sur la dérivée de la variable, Marter-Lagrange [116]

Modélisation finale

La discrétisation finale de l’équation de Poisson, prenant en compte une discontinuité de la variable et de la dérivée d’une variable, peut s’écrire :

$$\frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta} \right) - \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta} \right)}{\Delta} = f_i + F_i^L + F_i^R \quad (4.62)$$

Bien que le stencil de la discrétisation soit inchangé, les coefficients β sont estimés au-travers d’une pondération des distances à l’interface :

$$\begin{cases} \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i \beta_{i+1} (|\phi_i| + |\phi_{i+1}|)}{\beta_i |\phi_{i+1}| + \beta_{i+1} |\phi_i|} \\ \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i \beta_{i-1} (|\phi_i| + |\phi_{i-1}|)}{\beta_i |\phi_{i-1}| + \beta_{i-1} |\phi_i|} \end{cases} \quad (4.63)$$

La prise en compte de deux types de discontinuités (C^0 et C^1) se manifeste par l'ajout des termes F_i^L (pour le côté gauche) et F_i^R (pour le côté droit). Plus d'informations sur le calcul de ces termes sont disponibles dans la thèse de Couderc [39].

4.4.3. Saut de viscosité

Le saut de viscosité est estimé à partir de la prise en compte de la contrainte tangentielle, équation (4.41). Cette dernière nécessite le calcul des dérivées tangentielles de la vitesse à travers l'interface. Pour ce faire, Kang et al. [88] obtiennent l'équation matricielle suivante :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} [\mu u_x] & [\mu u_y] \\ [\mu v_x] & [\mu v_y] \end{pmatrix} &= [\mu] \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ t \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} 0 \\ t \end{pmatrix} \\ &+ [\mu] n^\top n \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix} n^\top n \\ &- [\mu] \begin{pmatrix} 0 \\ t \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} 0 \\ t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix}^\top n^\top n \end{aligned} \quad (4.64)$$

Cette équation traduit l'obtention du terme de saut sur les dérivées des vitesses à partir du calcul des termes de forçage de la méthode Ghost-Fluid. Grâce à cela, les équations de Navier-Stokes peuvent maintenant être résolues sur tout le domaine indépendamment du fluide considéré. La différenciation entre les deux fluides est réalisée par l'imposition des conditions de saut.

4.5. Conditions aux limites

L'ensemble des conditions limites employées dans les configuration d'études de cette thèse sont :

- Condition limite périodique.
- Condition limite d'entrée.
- Condition limite de glissement.
- Condition limite de sortie.

Ces dernières sont implémentées dans DYJEAT et sont détaillées dans les travaux de Zuzio [184], Marter-Lagrange [116] et Xavier [180].

4.6. Intégration temporelle

Une résolution temporelle très précise est nécessaire pour suivre correctement l'évolution de l'interface numérique. Le transport de la LS (ϕ), du VOF (C) et de la vitesse U dans l'étape de prédiction peuvent s'écrire plus généralement sous forme compacte :

$$\frac{d\xi}{dt} = P(\xi) \quad (4.65)$$

Deux méthodes sont disponibles dans DYJEAT pour intégrer ce terme. La première est celle d'Adams-Bashforth à pas multiples (s'inspirant de Vaudor et al. [175]) et la seconde est celle de type Runge-Kutta, Gottlieb and Shu [69].

La première réalise une intégration temporelle grâce à une combinaison linéaire des valeurs de P estimée aux pas de temps précédents.

$$\xi^{n+1} = \xi^n + \sum_{k=0}^n \alpha_{n-k} P(\xi^{n-k}) \quad (4.66)$$

Avec les coefficients α_{n-k} qui doivent être calculés. L'ordre et le coût de stockage de cette méthode sont directement reliés aux nombres de valeurs de P précédemment calculées.

La seconde (méthodes de Runge-Kutta) découpe l'intervalle d'intégration $[t^n, t^{n+1}]$ dans lequel le membre de droite de l'équation 4.65 est alors évalué et stocké. L'intégration finale est alors basée sur une combinaison linéaire de ces estimations, Gottlieb and Shu [69].

$$\xi^{(1)} = \xi^n \quad (4.67)$$

$$\xi^{(j)} = \xi^n + \Delta t^n \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{kj} P(\xi^{(k)}) \quad (4.68)$$

$$\xi^{n+1} = \xi^n + \Delta t^n \sum_{k=1}^K \beta_k P(\xi^{(k)}) \quad (4.69)$$

L'ordre ainsi que le coût de cette méthode sont directement reliés au nombre de sous itérations temporelles, désignées par le paramètre K .

L'ensemble des simulations se sont déroulées avec une intégration temporelle de type Runge-Kutta d'ordre deux. Bien que coûteuse, notamment pour l'équation en pression devant être résolue à chaque sous intervalle, la précision de la méthode dépasse cette contrainte.

4.7. Condition de stabilité temporelle

L'étape de prédiction, sous sa forme explicite, implique une limitation dans l'utilisation du pas de temps, désignée comme condition CFL. Cette dernière, implémentée dans DYJEAT, est donnée par Kang et al. [88].

$$\Delta t^n \left(C_{\text{conv}} + C_{\text{visc}} + \sqrt{(C_{\text{conv}} + C_{\text{visc}})^2 + 4(C_{\text{grav}} + C_{\text{capi}})} \right) \leq 2CFL \quad (4.70)$$

Avec les CFL liées aux différents phénomènes physiques :

$$C_{\text{conv}} = \frac{1}{\Delta} \max(\|u\|_{\infty}, \|v\|_{\infty}, \|w\|_{\infty}), \quad (4.71)$$

$$C_{\text{visc}} = \max\left(\frac{\mu_l}{\rho_l}, \frac{\mu_g}{\rho_g}\right) \frac{4}{\Delta} \quad (4.72)$$

$$C_{\text{grav}} = \frac{1}{\Delta} \sqrt{\max(|g_x|, |g_y|)}, \quad (4.73)$$

$$C_{\text{capi}} = \frac{\sigma \|\kappa\|_{\infty}}{\rho_g \Delta^2} \quad (4.74)$$

Le paramètre CFL est inférieur à 1/2. Une valeur de 0.4 est prise pour garantir la stabilité.

4.8. Conclusion

Dans cette partie, le modèle physique retenu a été présenté : équations de Navier-Stokes incompressibles, diphasiques et sans changement de phase. Par ailleurs, les méthodes numériques employées pour résoudre ce type d'écoulement ont été rapidement décrites : le maillage MAC, la méthode de projection de Chorin [37], le suivi d'interface en CLSVOF, la méthode Ghost-Fluid pour le couplage avec les conditions de sauts, les conditions limites et l'intégration temporelle.

D'autre part, le dernier développement de l'algorithme de convection de la quantité de mouvement pour de grands rapports de masse volumique (Marter-Lagrange [116], Zuzio et al. [186]) n'a pas été développé mais contribue à la stabilité du code. Tous ces développements enrichissent et assurent la robustesse du solveur DYJEAT, c'est pourquoi, ce dernier a été employé afin de réaliser des simulations d'atomisations assistées.

Algorithme de détection liquide

Ce chapitre présente l'algorithme de détection liquide développé puis inclus dans les outils numériques DYJEAT et ALGODETECT. Les différentes étapes de son fonctionnement sont détaillées ainsi que le transfert des bases de données produites vers des analyses Python. Suite à cela, une classification des structures en plusieurs catégories est proposée : gouttes, ligaments. L'algorithme de détection est validé au moyen d'une série de cas tests simples mais pertinents qui illustrent sa capacité à estimer correctement les propriétés géométriques des structures ainsi que leurs nombres. De plus, des tests de performance ont été réalisés pour s'assurer de son bon fonctionnement sur de larges simulations d'atomisation. Son temps d'exécution a été estimé par rapport au solveur DNS DYJEAT puis sa scalabilité sur l'analyse d'une simulation avec un nombre croissant de processeurs. Enfin, cette détection a été appliquée sur un instant d'une simulation DNS réaliste d'atomisation pour conforter son bon fonctionnement ainsi que la cohérence des critères précédents de classifications.

Sommaire

5.1. Contexte	86
5.2. La détection liquide dans les outils numériques	86
5.3. Fonctionnement de l'algorithme	87
5.3.1. Balisage des cellules	88
5.3.2. Identification de l'état des sommets des cellules	89
5.3.3. Diffusion d'une balise commune par structure	90
5.3.4. Propagation des balises entre processeurs	91
5.3.5. Collecte des données de chaque structure	94
5.4. Analyse et classification des structures	94
5.5. Validation de l'algorithme	96
5.5.1. Calcul de surface	96
5.5.1.1. Goutte statique	96
5.5.1.2. Cube statique déformé par sa tension de surface	97
5.5.2. Détection de structures	98
5.5.2.1. Spray de gouttes monodisperses	98
5.5.2.2. Spray de gouttes polydisperses	99
5.6. Performance	100
5.6.1. Temps d'exécution	100
5.6.2. Speedup	101
5.7. Analyse d'un instant d'une simulation DNS d'atomisation assistée	102
5.7.1. Configuration d'étude	103
5.7.2. Analyse qualitative des structures	103
5.8. Conclusion sur l'algorithme de détection liquide	105

5.1. Contexte

L'essor des capacités numériques a permis de réaliser des simulations d'atomisations de plus en plus précises se rapprochant des expériences, Herrmann [77] Shinjo and Umemura [158]. Toutefois, l'exploitation fine de ces dernières, à l'échelle des structures liquides internes, par les outils de visualisations et d'exploitations classiques, se retrouve limitée de part la trop grande taille des champs d'investigations.

En parallèle, des algorithmes de détection ont été bâtis afin de recueillir des informations simplifiées à partir d'images 2D, Samet and Tamminen [153] He et al. [72]. Plusieurs de ces familles d'algorithmes existent dont la plus connue est CCL (Connected Component Labeling) de D. A. Hebert [41], qui a été employée pour la première fois dans une simulation complète d'atomisation par Herrmann [78]. L'objectif était d'identifier les structures liquides sphériques (gouttelettes) pour les transférer au solveur Lagrangien de phase dispersée. Suite à cela, les applications de ce type d'algorithme se sont multipliées allant de la condition limite de solveur Lagrangien de phase dispersée (Grosshans et al. [71] Zuzio et al. [185] Heinrich and Schwarze [73]), à l'analyse de structures particulières : les gouttes (Herrmann [78], Li and Soteriou [103], Spitzenberger et al. [162], Hendrickson et al. [75]), les bulles (Deike et al. [44], Wang et al. [178]), la cavitation (Lidtko et al. [104], Ghahramani et al. [63]) et les lits fluidisés (Pepiot and Desjardins [134], Bakshi et al. [16], Uddin et al. [171]).

Dans un contexte d'atomisation, cette analyse de structure est généralement effectuée dans la zone de pulvérisation dite diluée, où les gouttelettes sont largement distribuées et espacées dans un grand volume de gaz, Nykteri et al. [125]. De cette manière, l'identification des structures est simplifiée pour l'algorithme CCL dont une des limitations est l'incertitude dans l'étape de balisage des cellules de différentes structures relativement proches (de l'ordre de la taille de maille).

La méthode usuelle d'identification de structures liquides consistent à identifier des ensembles de noeuds ou de cellules connectés qui correspondent à des structures individuelles. Ainsi, cette méthode s'applique correctement à des schémas d'advection d'interface pour lequel cette dernière est bien définie. Cela nécessite donc que la fraction de volume dans chaque noeud ou cellule puisse être reconstruite (PLIC). De cette manière, la détection liquide est compatible avec les méthodes géométriques VOF (C), LS (ϕ) et Front-Tracking. Dans les approches algébriques à interface diffuse cette opération devient possible si une étape de compression d'interface est réalisée au préalable.

Dans ce chapitre une nouvelle méthode de détection de structures liquides est proposée. Cette dernière s'inspire du fonctionnement des méthodes CCL (plus particulièrement de sa version améliorée ICL) tout en s'abstenant de critères arbitraires de regroupement, séparation, pour identifier les structures. De cette manière, cet algorithme peut détecter n'importe quels types de structures liquides (gouttes, ligaments, membranes, ...) et sauvegarder ces caractéristiques dans une base données externe, un fichier de sortie. Enfin, cet algorithme a été conçu pour traiter efficacement de larges champs 3D en parallèle (jusqu'à $4 \cdot 10^9$ points par champ) et en quelques secondes. Un seuil liquide, C_{seuil} , est mis en place afin que les plus petites structures n'apparaissent pas dans la création de la base de données issue de la détection.

5.2. La détection liquide dans les outils numériques

L'algorithme de détection présenté par la suite a été implémenté dans deux outils numériques différents pour répondre à des besoins distincts.

Le premier de ces outils est le code DYJEAT dans lequel la détection est effectuée à une fréquence temporelle définie par l'utilisateur, Figure 5.1a. Cette opération se base sur les champs VOF (C) et LS (ϕ) couramment stockés en mémoire dans le code. L'avantage de cette configuration est de pouvoir effectuer la détection à une fréquence élevée (supérieure à celle d'enregistrement des sorties) et d'obtenir les bases de données associées. À l'opposé, le principal inconvénient est la nécessité de relancer une simulation pour avoir de nouveaux fichiers de sorties, notamment pour une nouvelle quantité d'analyse.

Le second outil est un code Fortran (ALGODETECT) dont la construction MPI est similaire à DYJEAT. Ce dernier lit et sauvegarde en mémoire les fichiers sortis de DYJEAT (format binaire Ensign) pour effectuer l'opération de détection, Figure 5.1b. Cette configuration a l'avantage d'être flexible pour l'ajout ou le retrait de nouvelle quantité d'analyse dans les fichiers de sorties. D'autre part, en fonction des besoins de l'utilisateur, les sorties peuvent être multiples : base de données, champ scalaire, champ vectoriel etc. Enfin, cette détection ne s'appuie que sur les sorties enregistrées de DYJEAT, autrement dit, cette opération est reproductible tant que ces dernières existent. Ce point est aussi son principal inconvénient puisque l'analyse fine de simulation temporelle nécessite donc un enregistrement à haute fréquence des fichiers de sorties.

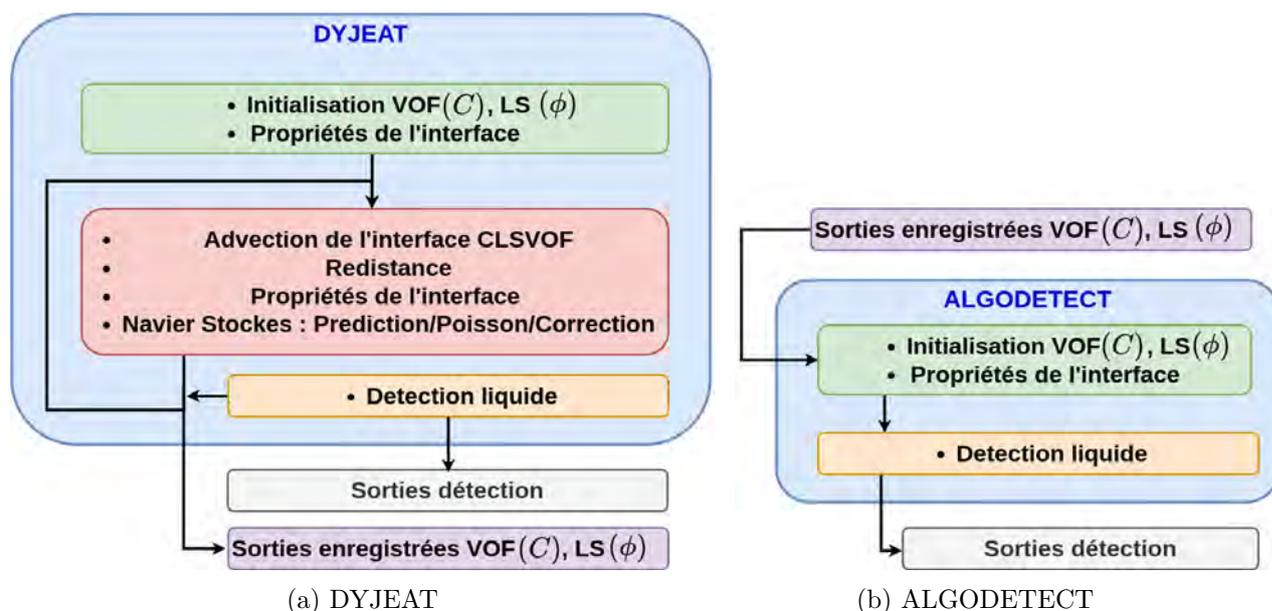


FIGURE 5.1. – Inclusions de l'algorithme de détection liquide dans des outils numériques.

L'algorithme de détection présent dans le code DYJEAT et ALGODETECT est identique, c'est pourquoi la description de son fonctionnement n'est pas associée à une configuration particulière. De plus, la description suivante repose sur un fonctionnement MPI, c'est-à-dire d'un point de vue par processeur.

5.3. Fonctionnement de l'algorithme

Une attention particulière a été accordée à l'efficacité de l'algorithme, en termes de temps d'exécution et de consommation mémoire. Tout d'abord, ce dernier se base sur un principe de propagation de balise (commun aux algorithmes de type CCL), à travers une fonction de minimisation qui implique de balayer plusieurs fois le domaine numérique. Dans cette optique, le nombre de boucles sur le domaine numérique a été minimisé en y rassemblant toutes les opérations nécessaires au fonctionnement général de l'algorithme.

De plus, l'algorithme a été écrit en Fortran avec le protocole de communication parallèle MPI. Chaque processeur analyse et balaye son propre domaine afin d'accélérer l'affectation des balises. D'autre part, ce protocole de communication facilite les échanges entre processeurs afin de diffuser et récolter des informations sur les structures balisées. En effet, un seul processeur atteindrait rapidement sa limite mémoire (RAM) lors d'analyse de grands champs calculés par DYJEAT, Figure 5.2. Enfin, pour limiter le coût mémoire global, un nouveau communicateur MPI a été créé et ne regroupe que les processeurs ayant dans leur domaine une portion de liquide.

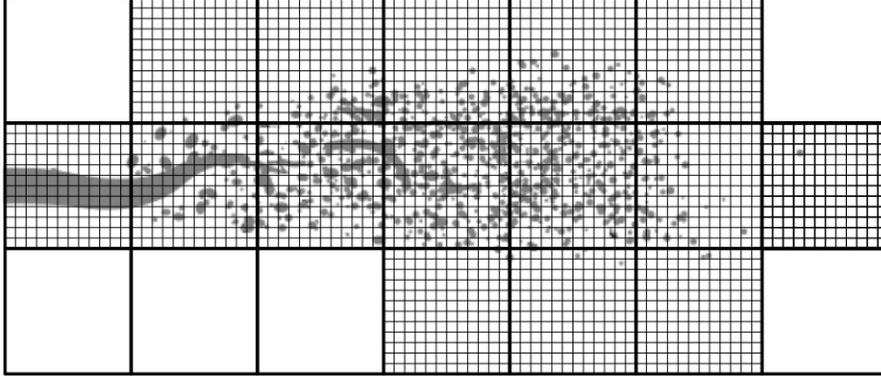


FIGURE 5.2. – Exemple de répartition de processeurs utilisés pour la détection liquide.

Le principe de fonctionnement de cet algorithme peut être synthétisé en plusieurs étapes :

- Balisage des cellules.
- Identification de l'état des sommets des cellules.
- Diffusion d'une balise commune par structure.
- Propagation des balises entre processeurs.
- Collecte des données de chaque structure.

5.3.1. Balisage des cellules

La première étape de l'algorithme consiste à attribuer un numéro de balise unique à chaque cellule contenant un liquide, c'est-à-dire $C_{i,j,k} \geq C_{seuil}$. Ce numéro de balise ($Tag_{i,j,k}$) est construit à partir d'un compteur (*compteur*) et d'un offset initial (Tag_{init}). Le compteur local est incrémenté dès qu'une cellule liquide est rencontrée tandis que le décalage initial provient du numéro du processeur (n_{proc}) et du nombre total de cellules dans le domaine local ($n_{cell\ proc}$) :

$$Tag_{init} = (n_{proc} - 1)n_{cell\ proc} \quad (5.1)$$

A contrario, lorsqu'une cellule n'a pas suffisamment de liquide, $C_{i,j,k} < C_{seuil}$, une valeur de balise arbitraire lui est affectée ($Tag_{i,j,k} = n_{cell\ tot}$). Cette dernière correspond à une limite maximale inatteignable lors de l'affectation des balises aux cellules liquides.

$$n_{cell\ tot} = (\max(n_{proc}))n_{cell\ proc} + 1 \quad (5.2)$$

L'affectation des balises s'effectue en bouclant sur l'ensemble des cellules du domaine et peut être résumée avec l'équation (5.3).

$$Tag_{i,j,k} = \begin{cases} \begin{cases} compteur + Tag_{init} \\ compteur = compteur + 1 \end{cases} & \text{si } C_{i,j,k} \geq C_{seuil} \\ n_{cell\ tot} & \text{si } C_{i,j,k} < C_{seuil} \end{cases} \quad (5.3)$$

La constante $n_{cell\ tot}$ garantit que seules les cellules liquides sont prises en compte par la suite, puisque la propagation des balises repose sur une fonction de minimisation de valeur, décrite par la suite. Un exemple de cette première opération de balisage des cellules liquides est présenté Figure 5.3. Les termes **P0**, **P1**, **P2** et **P3** désignent quatre processeurs tandis que les cellules composées de gaz ($Tag_{i,j,k} = n_{cell\ tot}$) n'ont pas leurs balises représentées.

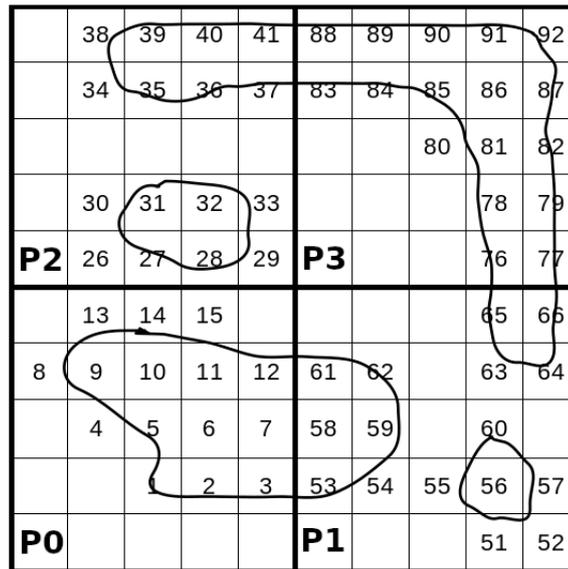


FIGURE 5.3. – Balises dans les cellules liquides pour quatre domaines, processeurs.

5.3.2. Identification de l'état des sommets des cellules

Un des problèmes connus des algorithmes de détection concerne la détection et la distinction de structures rapprochées (distante de l'ordre de la taille de maille). Pour pallier cela, divers seuils, critères de distinctions, plus ou moins restrictifs sont mis en place pour éviter la propagation de balise à une ou plusieurs structures environnantes non reliées, D. A. Hebert [41], Ma et al. [111], Yu et al. [183], Spitzenberger et al. [162].

Pour s'affranchir de cette limitation, l'algorithme de détection s'inspire de la méthode ICL (Informed Component Labeling) de Hendrickson et al. [75] avec son utilisation des normales aux interfaces. Cette idée est ré-utilisée dans cet algorithme avec une reconstruction PLIC de l'interface qui permet d'atteindre une précision de détection inférieure à la taille de maille Δ .

Grâce à cette reconstruction, les coefficients a , b , c et d du plan de l'interface par les fonctions VOF (C) et LS (ϕ) sont accessibles. Suite à cela, la fonction LS (ϕ) est évaluée aux sommets de chaque cellule liquide balisée, Figure 5.4a. Un booléen est affecté, pour chaque cellule, aux huit sommets avec une valeur True ou False suivant si ce dernier est immergé ou non, Figure 5.4b.

Ce raisonnement s'applique à chaque cellule du domaine de simulation. Ainsi, un noeud commun à plusieurs cellules y possède un booléen qui est représentatif de son état local (immergé ou non en fonction de la reconstruction PLIC locale).

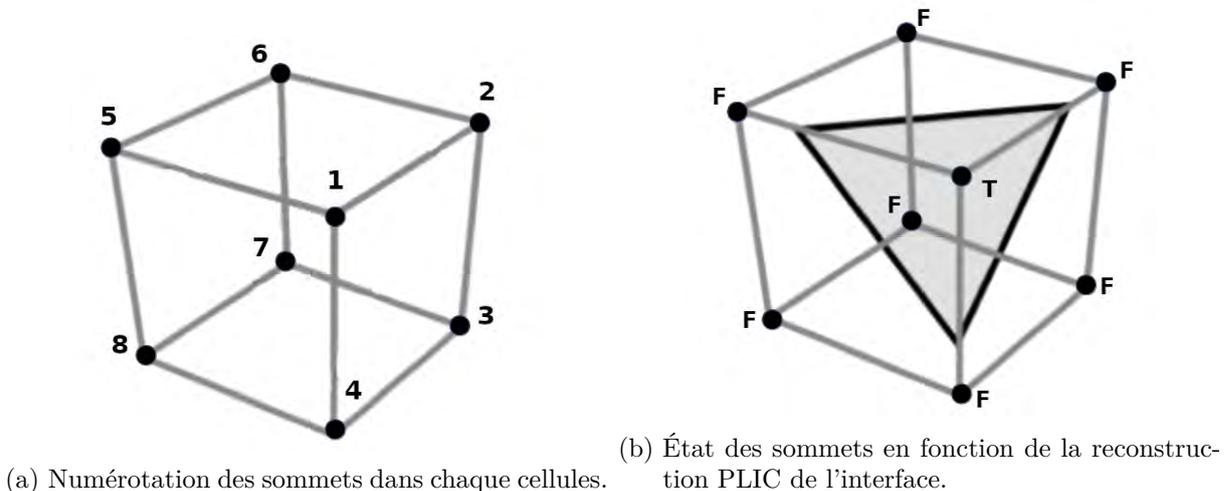


FIGURE 5.4. – Affectation de l'état des sommets des cellules par une reconstruction PLIC.

5.3.3. Diffusion d'une balise commune par structure

Les différentes structures liquides sont identifiables au moyen d'une balise unique, commune à toutes les cellules la constituant. Pour réaliser cela, un bouclage sur l'ensemble des cellules du domaine est réalisé en répétant, à chaque cellule les opérations suivantes :

- Identification des cellules adjacentes valides au-travers de l'état des noeuds communs.
- Actualisation de la balise courante par une diffusion de la valeur minimale des balises des cellules voisines valides.

La première étape est réalisée grâce aux booléens définis aux sommets des cellules. Une cellule adjacente devient valide si au moins un des noeuds en commun est immergé dans les deux cellules (état équivalent à True). Cette double condition ne conserve que les cellules cohérentes pour la structure liquide courante et assure ainsi une précision sous maille pour son identification. Pour rappel, 8 cellules adjacentes sont potentiellement valides en 2D et 26 en 3D.

Un exemple 2D est présentée Figure 5.5 avec le sens d'inspection des cellules (la flèche bleu) ainsi que les interfaces au sein de ces dernières visibles. Les différentes étapes d'identifications des cellules adjacentes valides ainsi que l'actualisation de la balise courante sont illustrées Figures 5.6, 5.7 et 5.8 pour les cellules n°1, n°2 et n°3.

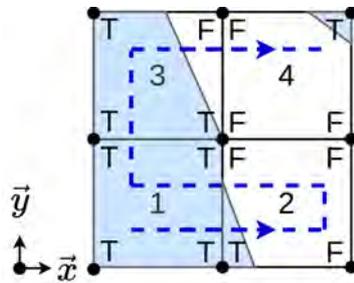


FIGURE 5.5. – Balises initiales, états des noeuds des cellules et sens d'inspection.

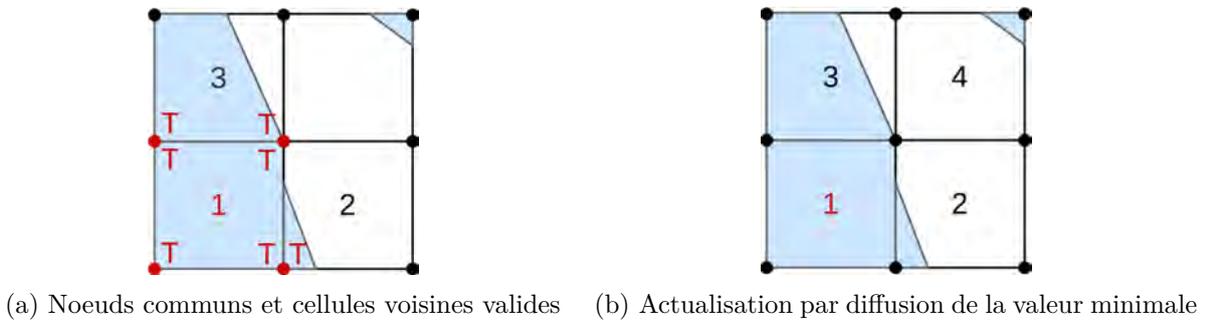


FIGURE 5.6. – Inspection de la cellule n°1.

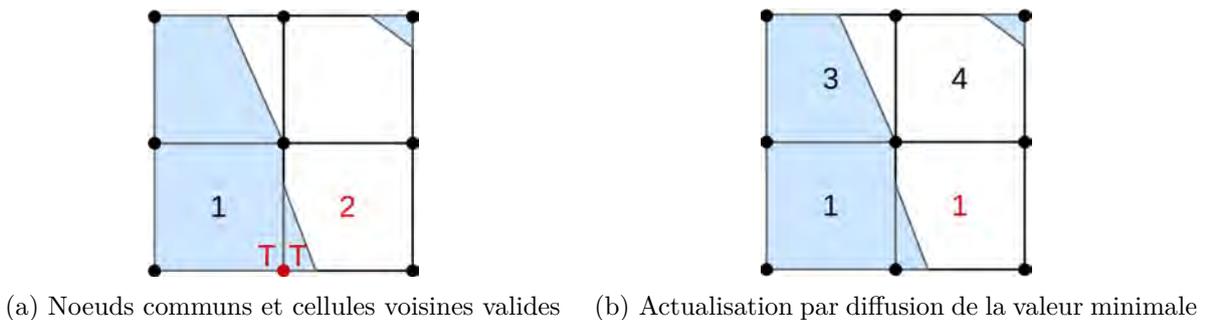


FIGURE 5.7. – Inspection de la cellule n°2.

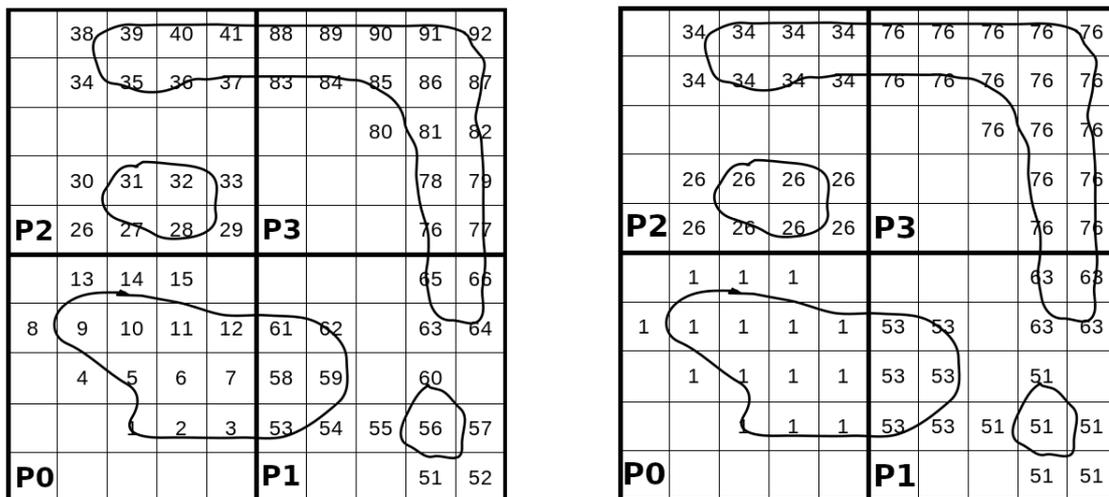


(a) Noeuds communs et cellules voisines valides (b) Actualisation par diffusion de la valeur minimale

FIGURE 5.8. – Inspection de la cellule n°3.

Cette actualisation des balises des cellules possédant du liquide est répétée dans le domaine du processeur jusqu'à ce qu'aucun changement de balise ne soit détecté, Figure 5.9. L'affection croissante des balises par cellule liquide, équation (5.3), associée à la diffusion de la balise minimale par structure réduit le nombre d'itérations nécessaires sur l'ensemble du domaine.

À cette étape, chaque structure liquide possède une balise unique dans chaque domaine. Toutefois, certaines structures liquides peuvent être réparties sur plusieurs processeurs, en particulier les ligaments, et avoir des valeurs de balises différentes. Pour cette raison, la prochaine étape concerne la propagation de balises entre processeurs.



(a) Avant l'opération de diffusion de la balise mini- (b) Après l'opération de diffusion de la balise mini-
male male

FIGURE 5.9. – Balises communes par structures dans chaque processeurs.

5.3.4. Propagation des balises entre processeurs

L'identification finale des structures liquides nécessite le transfert d'informations des balises entre processeurs. Cela est réalisé grâce aux communications MPI de type plan, arêtes et coin qui actualisent les cellules fantômes (ghost-cells, employées par les schémas numériques en bord de domaine). Tout ceci doit permettre d'identifier de façon unique les structures réparties dans plusieurs domaines. Cette procédure peut être décomposée en deux étapes :

- Transfert et diffusion des balises au bord du domaine .
- Mise à jour des cellules internes dans chaque processeur.

Le transfert et la diffusion des balises en bord du domaine a pour objectif de propager, le plus rapidement possible, les balises finales des structures répandues sur plusieurs domaines. Pour cela, les balises sont mises à jour dans les cellules fantômes de chaque processeur, Figure 5.10.

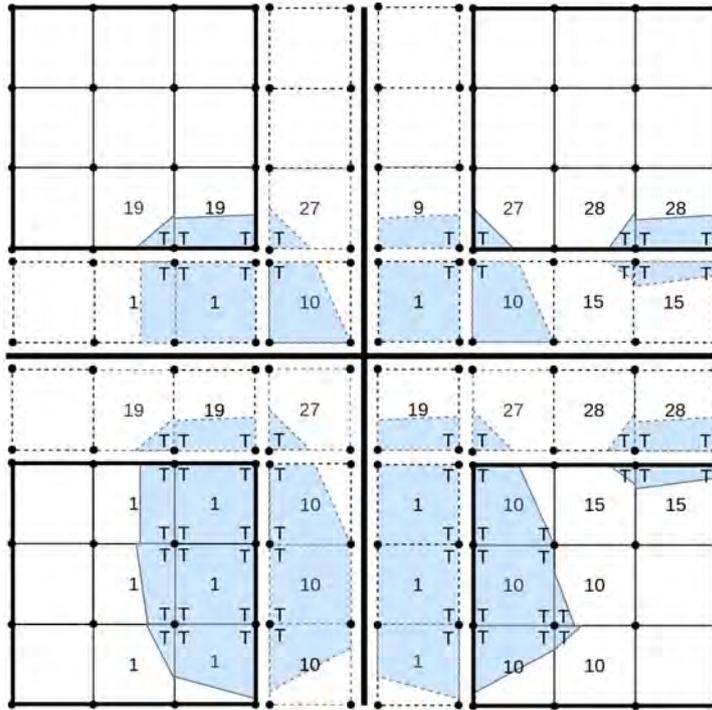


FIGURE 5.10. – Actualisation des cellules fantômes avec les balises.

Toutefois, seules les cellules en bord de domaine actualisent leurs balises grâce à leurs voisins fantômes, Figure 5.11. Pour cela, chaque processeur sauvegarde dans un tableau les valeurs initiales des balises ainsi que leurs potentielles nouvelles valeurs. Un processus itératif est réalisé sur ce tableau de sorte que, dès qu'une balise du bord est actualisée, toutes celles (du bord) ayant eu la même valeur initiale le sont aussi. Cette opération permet de mettre à jour rapidement toutes les balises du bord sans boucler sur l'ensemble du domaine. D'autre part, dès qu'un changement de balise de bord est détecté dans un processeur, une communication collective MPI répète les opérations précédentes (actualisation des cellules fantômes et bouclage sur les cellules au bord).

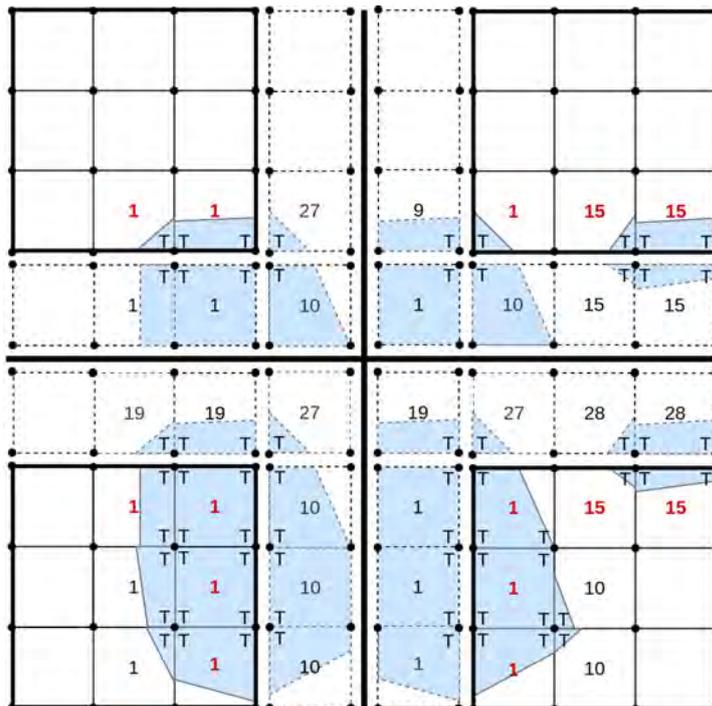
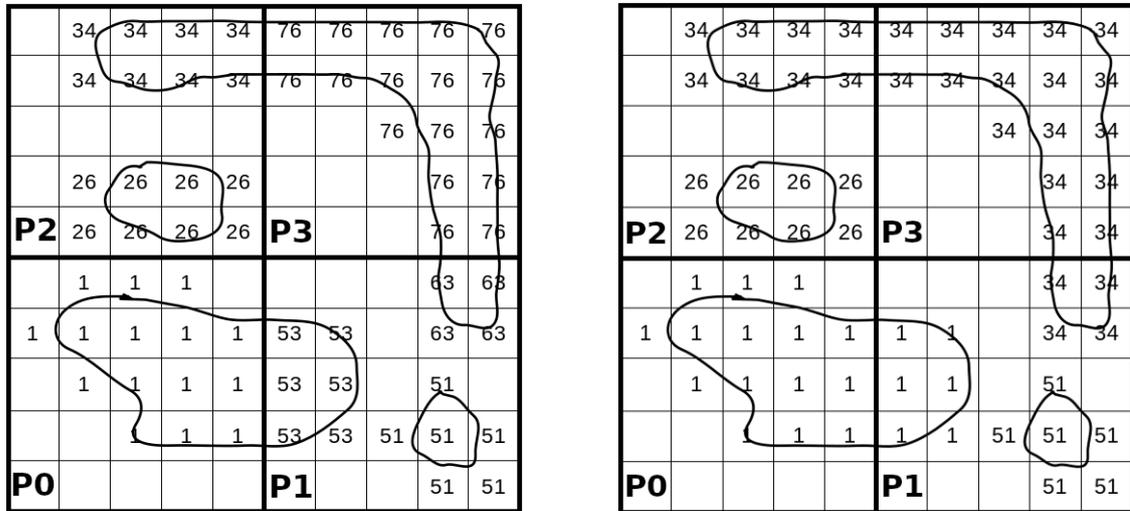


FIGURE 5.11. – Actualisation des balises en bord de domaine.

Lorsque cette opération est terminée, l'ensemble des cellules de bord possèdent les balises finales. La dernière étape consiste à actualiser l'intérieur du domaine de chaque processeur en répétant la diffusion de balises décrites précédemment section 5.3.3, Figure 5.12.



(a) Avant l'opération de diffusion entre processeurs (b) Après l'opération de diffusion entre processeurs

FIGURE 5.12. – Balises uniques par structures sur l'ensemble des processeurs.

Pour une plus grande souplesse d'analyse, une communication collective MPI diffuse et regroupe la liste des balises finales de chaque processeur. Connaissant le nombre de balises différentes, qui représente le nombre de structures finales, une dernière opération d'actualisation est effectuée sur ces dernières pour les faire évoluer de 1 à n_{struc} (le nombre maximal de structures dans l'ensemble du domaine) Figure 5.13.

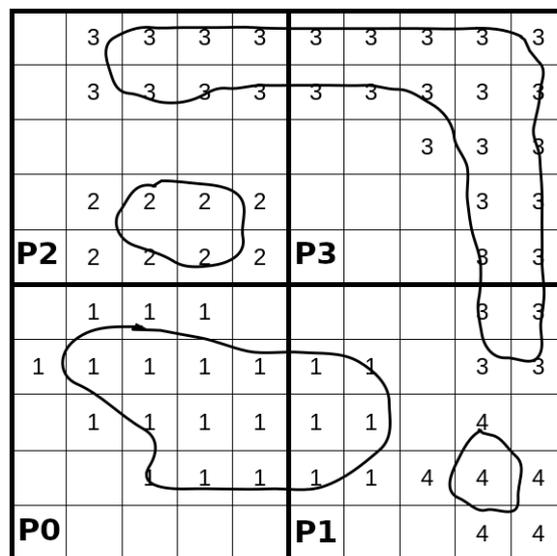


FIGURE 5.13. – Balises finales.

Cette description de l'algorithme fonctionne pour l'ensemble des conditions limites décrites dans la section 4.5 hormis celles périodiques. Pour pallier cela, les processeurs aux limites du domaine voient leurs cellules, à leur tour en bord domaine externe, subir un traitement spécial durant l'actualisation des cellules. Ces dernières, normalement non actualisées dans l'étape de propagation entre processeurs, puisque en bordure externe du domaine, le deviennent avec les cellules des processeurs du bord opposé. Ce traitement permet de propager correctement les balises lorsque ce type de conditions aux limites est employé.

5.3.5. Collecte des données de chaque structure

Une fois que les structures liquides individuelles ont été identifiées au moyen d'une balise unique, la prochaine étape est de recueillir des informations les concernant. Pour cela, de nouvelles opérations collectives MPI sont utilisées afin de rassembler les informations des structures réparties sur plusieurs processeurs. Les données collectées pour chaque structure détectée sont les suivantes :

- Surface exacte de l'interface estimée par la méthode VOFTools, S .
- Volume, V .
- Position du centre de gravité, $\overrightarrow{Pos}_{cg}$.
- Dimension maximale, $\overrightarrow{Pos}_{max}$.
- Dimension, \overrightarrow{l} .
- Vitesse au centre de gravité, \overrightarrow{U}_{cg} .

$$S(i) = \sum_{Tag=i} S^{VOFTools} \quad (5.4)$$

$$V(i) = \sum_{Tag=i} C \Delta^3 \quad (5.5)$$

$$\overrightarrow{Pos}_{cg}(i) = \begin{pmatrix} x_{cg}(i) \\ y_{cg}(i) \\ z_{cg}(i) \end{pmatrix} = \sum_{Tag=i} C \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} \Delta^3 \quad (5.6)$$

$$\overrightarrow{Pos}_{max}(i) = \begin{pmatrix} x_{cg \ max}(i) \\ y_{cg \ max}(i) \\ z_{cg \ max}(i) \end{pmatrix} = \max_{Tag=i} \begin{pmatrix} x(i) \\ y(i) \\ z(i) \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

$$\overrightarrow{l}(i) = \begin{pmatrix} l_x(i) \\ l_y(i) \\ l_z(i) \end{pmatrix} = \max_{Tag=i} \begin{pmatrix} x(i) \\ y(i) \\ z(i) \end{pmatrix} - \min_{Tag=i} \begin{pmatrix} x(i) \\ y(i) \\ z(i) \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

$$\overrightarrow{U}_{cg}(i) = \overrightarrow{U}(\overrightarrow{Pos}_{cg}(i)) \quad (5.9)$$

5.4. Analyse et classification des structures

L'ensemble des sorties détections de DYJEAT ou d'ALGODETECT constitue un ensemble de bases de données recueillant des informations spécifiques aux structures présentes durant les instants d'analyses. Le langage de programmation Python est choisie pour poursuivre l'analyse de ces fichiers pour sa plus grande flexibilité à manier de larges banques de données ainsi que ses nombreuses possibilités d'analyses et de visualisations, Figure 5.14.

Suite à cela, une catégorisation des structures détectées est possible en fonction de plusieurs critères topologiques.

Le premier illustre la sphéricité de la structure, β , en faisant le rapport de la surface équivalente, calculée par approximation sphérique à partir du volume, et la surface réelle estimée, Figure 5.15.

$$\beta(i) = \frac{4\pi \left(\frac{3V(i)}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}}}{S(i)} \quad \beta_{min} \leq \beta(i) \leq \beta_{max} \quad (5.10)$$

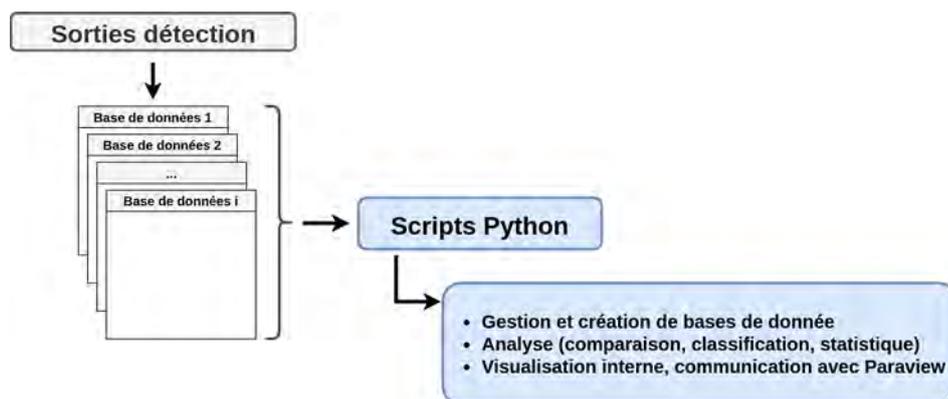


FIGURE 5.14. – Transfert des données issues de la détection vers une analyse Python.

Le deuxième critère détermine si la structure, au-travers des dimensions de son enveloppe \vec{l} , possède une ou plusieurs orientations privilégiées, Figure 5.15.

$$\gamma(i) = \left(\frac{l_x(i) + l_y(i) + l_z(i)}{\max(l_x(i), l_y(i), l_z(i))} - 1 \right)^{-1} \quad \gamma_{min} \leq \gamma(i) \leq \gamma_{max} \quad (5.11)$$

Enfin, le dernier critère, ξ , estime le rapport entre le volume de l'enveloppe est celui de la structure en question, Figure 5.15.

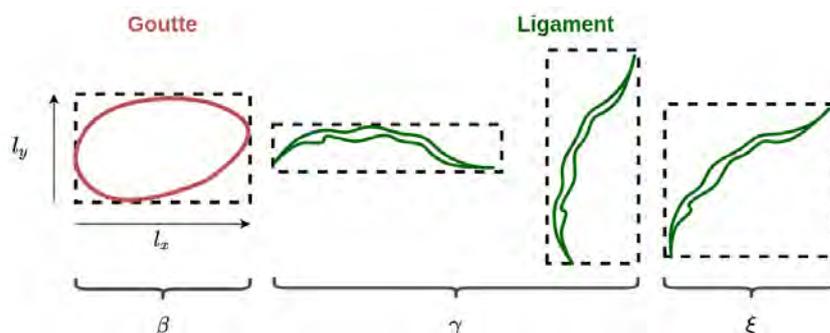
$$\xi(i) = \frac{l_x(i)l_y(i)l_z(i)}{V(i)} \quad \xi_{min} \leq \xi(i) \leq \xi_{max} \quad (5.12)$$

Pour être associée à une goutte, une structure doit être grandement sphérique, ne pas posséder d'orientation privilégiée ainsi qu'avoir un volume liquide proche de celui de son enveloppe. A contrario, un ligament doit être peu sphérique, posséder une ou deux orientations privilégiées ou bien avoir un volume d'enveloppe largement supérieur à son volume liquide. Les seuils employés pour définir ces catégories sont résumés Table 5.1, leurs valeurs calibrées sur un ensemble de cas test pratiques.

	β_{min}	β_{max}	γ_{min}	γ_{max}	ξ_{min}	ξ_{max}
Goutte	0.75	1.0	0	0.6	0	3
Ligament	0	0.75	1.0	-	7	-

TABLE 5.1. – Seuils pour différencier les catégories.

Ces trois critères, β , γ et ξ , sont employés pour différencier et identifier les structures d'après leurs propriétés géométriques, Figure 5.15.

FIGURE 5.15. – Principales catégories de structures en fonction des critères β , γ et ξ .

5.5. Validation de l'algorithme

Pour s'assurer du bon fonctionnement de l'algorithme et des résultats qui en découlent, une validation en plusieurs étapes a été réalisée. Tout d'abord, la bonne inclusion de la bibliothèque VOFTools dans l'algorithme de détection a été investiguée au-travers de cas tests de détection d'objet unique, section 5.5.1, puis la quantité de structures détectées a été vérifiée au-travers de tests sur des sprays de gouttes, section 5.5.2.

5.5.1. Calcul de surface

Grâce à un ensemble d'opérations géométriques, la bibliothèque VOFTools fournit une estimation explicite de la surface et du volume du liquide à partir de la reconstruction PLIC de l'interface. Des cas de tests simples sont présentés ci-dessous pour valider la précision de ces deux estimations. Pour cela, des formes géométriques simples, dont les caractéristiques sont connues analytiquement, ont été simulées puis détectées pour une comparaison de résultats.

5.5.1.1. Goutte statique

La forme géométrique tridimensionnelle la plus simple est une sphère. Dans ce cas test, une sphère unique est centrée dans un domaine cubique de taille L , avec un diamètre de $L/2$. Les équations de Navier-Stokes ne sont pas résolues, seuls les champs de LS (ϕ) et VOF (C) sont initialisés, pour permettre à l'analyse topologique d'être effectuée.

Une mesure du volume et de la surface de la goutte a été obtenue pour différents maillages ($\epsilon_{v\ mes}$, $\epsilon_{s\ mes}$). Grâce à ces dernières, des erreurs relatives de volume et de surface, équations (5.13) et (5.14), sont construites à partir des valeurs analytiques ($\epsilon_{v\ ref}$ et $\epsilon_{s\ ref}$) et sont présentées dans la Figure 5.16.

$$\epsilon_v = |\epsilon_{v\ mes} - \epsilon_{v\ ref}| / \epsilon_{s\ ref} \quad (5.13)$$

$$\epsilon_s = |\epsilon_{s\ mes} - \epsilon_{s\ ref}| / \epsilon_{s\ ref} \quad (5.14)$$

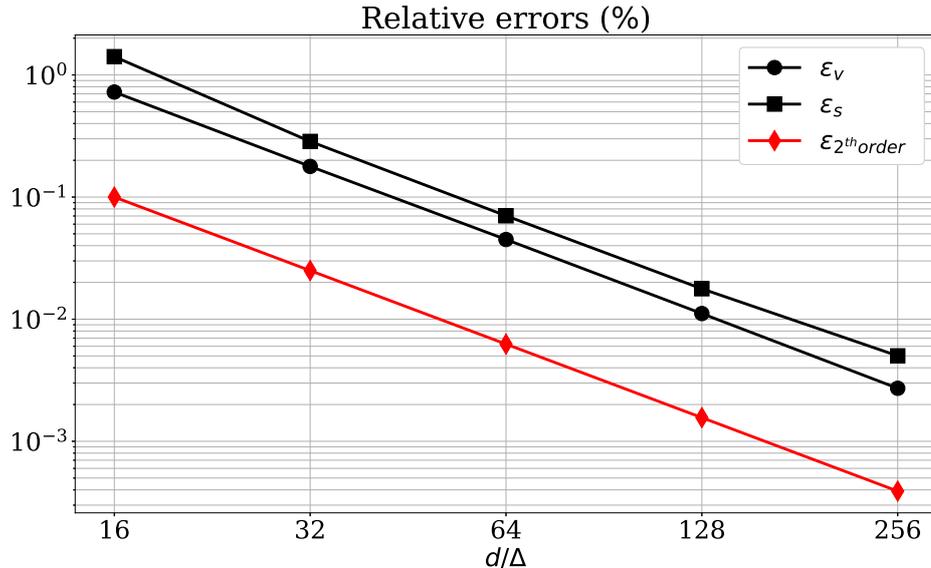


FIGURE 5.16. – Décroissance des erreurs relatives en fonction des maillages.

Les erreurs relatives (ϵ_s et ϵ_v) se comportent de manière similaire avec l'affinement du maillage. L'erreur relative maximale est proche de 1 % pour le maillage le plus grossier, $d/\Delta = 16$. Les graphiques montrent une convergence du second ordre ($\epsilon_{2^{th} order}$) à la fois pour le volume et la surface calculés.

5.5.1.2. Cube statique déformé par sa tension de surface

Ce cas dynamique résout les équations de Navier-Stokes pour les deux phases et analyse le champ liquide résultant. Une configuration similaire à la précédente a été choisie dans laquelle une solution de référence est connue. Ce cas test simule la dynamique d'un cube liquide de côté $a = L/2$, immergé dans un domaine de taille L et soumis aux effets de viscosité et de capillarité.

La tension superficielle déforme l'état initial du cube et déclenche des oscillations liquides à son interface. Ces dernières doivent être amorties par les forces visqueuses jusqu'à ce que le liquide atteigne la forme géométrique la plus stable, une sphère, Figure 5.17. Les paramètres physiques sont fixés de manière à converger rapidement vers la solution d'équilibre et sont présentés dans la Table 5.2.

ρ_g	U_g	μ_g	ρ_l	U_l	μ_l	σ	L	a
1.2	0	$1.5 \cdot 10^{-5}$	1.2	0	$1.002 \cdot 10^{-1}$	72	$40 \cdot 10^{-3}$	$20 \cdot 10^{-3}$
kg/m ³	m s ⁻¹	Pa s	kg/m ³	m s ⁻¹	Pa s	N m ⁻¹	m	m

TABLE 5.2. – Propriétés des fluides et géométriques pour le cas d'essai du cube.

Grâce à la connaissance des formes géométriques initiales et finales du liquide, une estimation de la surface est facilement accessible dans ces deux situations. De plus, le liquide est conservé durant ce cas test, ce qui permet de compléter ces prédictions, équations (5.15) et (5.16).

$$V_{cube} = a^3 \qquad S_{cube} = 6a^2 \qquad (5.15)$$

$$V_{sphere} = V_{cube} = a^3 \qquad S_{sphere} = 4\pi \left(\frac{3V_{sphere}}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \qquad (5.16)$$



FIGURE 5.17. – États topologique du liquide.

Les erreurs relatives de volume et de surface (ϵ_v , ϵ_s équations (5.13) et (5.14)) sont estimées dans les deux états connus, le cube et la sphère. Ces estimations sont effectuées au début du calcul, (t_{init}), et en fin de simulation (t_{fin}), lorsque la valeur de surface ne varie plus, Table 5.3.

L'erreur relative de volume maximale reste inférieure à 0.1 %, ce qui confirme la conservation du liquide. L'erreur relative de surface maximale est faible, inférieure à 3 %, et se produit au début, probablement en raison des arêtes vives du cube. Les structures liquides produites lors de l'atomisation ne possèdent pas d'arêtes, de courbures locales aussi importantes. Pour cette raison, la valeur obtenue dans l'état final, 0.62 %, est plus représentative dans ce cas test et assure une mesure précise de l'interface.

	t_{init}	t_{fin}
ϵ_v (%)	0.05	0.09
ϵ_s (%)	2.88	0.62

TABLE 5.3. – Erreurs relatives de volume et surface pour les formes cubique et sphérique (t_{init} , t_{fin}).

5.5.2. Détection de structures

Dans cette section, les capacités de l'algorithme de détection à identifier précisément plusieurs objets ont été testées. Pour cela, des configurations numériques simples (sprays de gouttes) ont été employées afin de vérifier si le nombre de gouttes détectées ainsi que leurs propriétés géométriques sont précisément estimées.

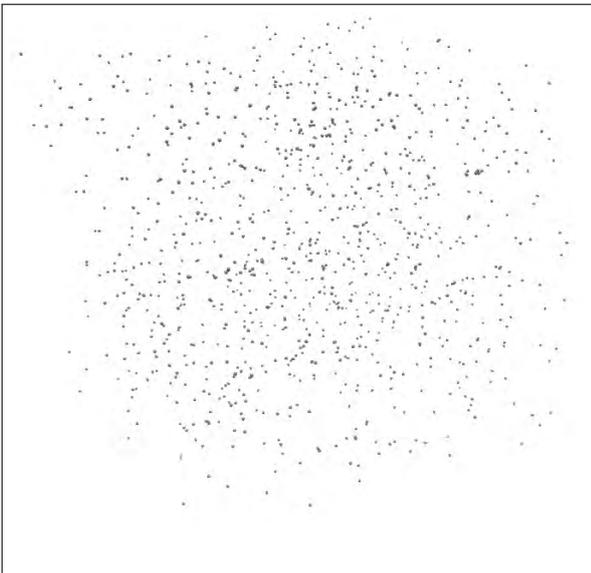
5.5.2.1. Spray de gouttes monodisperses

Ce cas test considère un nuage de gouttes monodisperses distribué aléatoirement dans un domaine numérique cubique de côté unitaire. Le diamètre des gouttes et la résolution du maillage sont respectivement notés d et Δ . Plusieurs configurations de sprays sont considérées, avec un nombre croissant de gouttes initialisées $N_{init}=\{50,100,500,1000\}$. L'objectif est d'illustrer, dans un contexte parallèle, de potentiels écarts dans l'estimation du nombre de gouttes et de ses propriétés.

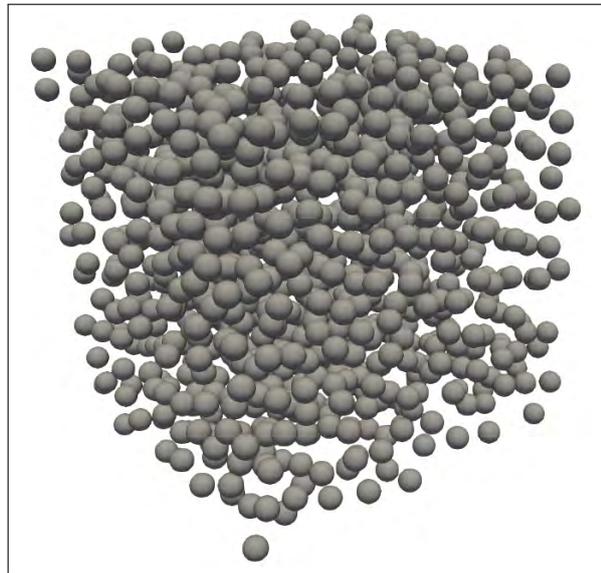
De plus, deux diamètres de gouttes ont été employés, $d/\Delta = \{4; 30\}$, pour estimer de potentiels écarts sur des mesures de gouttes très bien et sous résolues, Figure 5.18. Le nombre de gouttes détectées, N_{detect} , ainsi que les erreurs relatives de surface et de volume, (ϵ_v, ϵ_s équations (5.13) et (5.14)), ont été notées dans la Table 5.4 pour chacune de ces configurations.

d/Δ	N_{init}	N_{detect}	ϵ_v (%)	ϵ_s (%)
4	50	50	4.22	1.12
	100	100	4.35	1.08
	500	500	4.25	1.21
	1000	1000	4.34	1.23
30	50	50	0.14	0.12
	100	100	0.14	0.12
	500	500	0.14	0.12
	1000	1000	0.14	0.12

TABLE 5.4. – Résultats de l'algorithme de détection pour l'analyse des sprays de gouttes monodisperses.



(a) $N_{init} = 1000, d/\Delta = 4$



(b) $N_{init} = 1000, d/\Delta = 30$

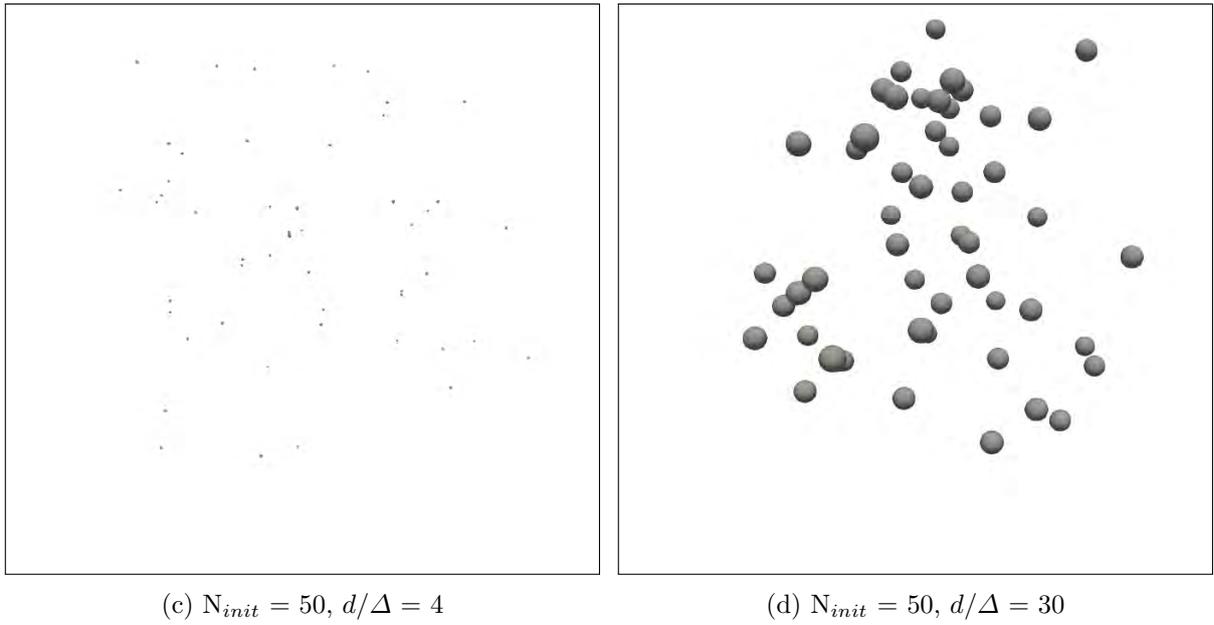


FIGURE 5.18. – Cas tests de sprays de gouttes monodisperses.

Ces simulations effectuées sur 512 processeurs confirment que l'algorithme développé est bien adapté à la détection de structures liquides en parallèle. Le nombre de gouttes identifiées est identique à celui initialisé et les écarts relatifs en volume et surface restent en dessous des 5 % pour la configuration sous-résolue.

5.5.2.2. Spray de gouttes polydisperse

Cette configuration d'étude se rapproche d'un cas réel avec un spray polydisperse. Ce dernier est constitué d'une distribution aléatoire de diamètre des gouttes, Figure 5.19a. L'objectif de cette analyse est de tester les capacités de l'algorithme à identifier et estimer le nombre de gouttes correctement, ainsi que de reproduire la distribution de diamètres associée.

La nuage simulé est représenté, Figure 5.19a, avec la distribution initiale (noir) et celle issue de la détection (gris) visible, Figure 5.19b.

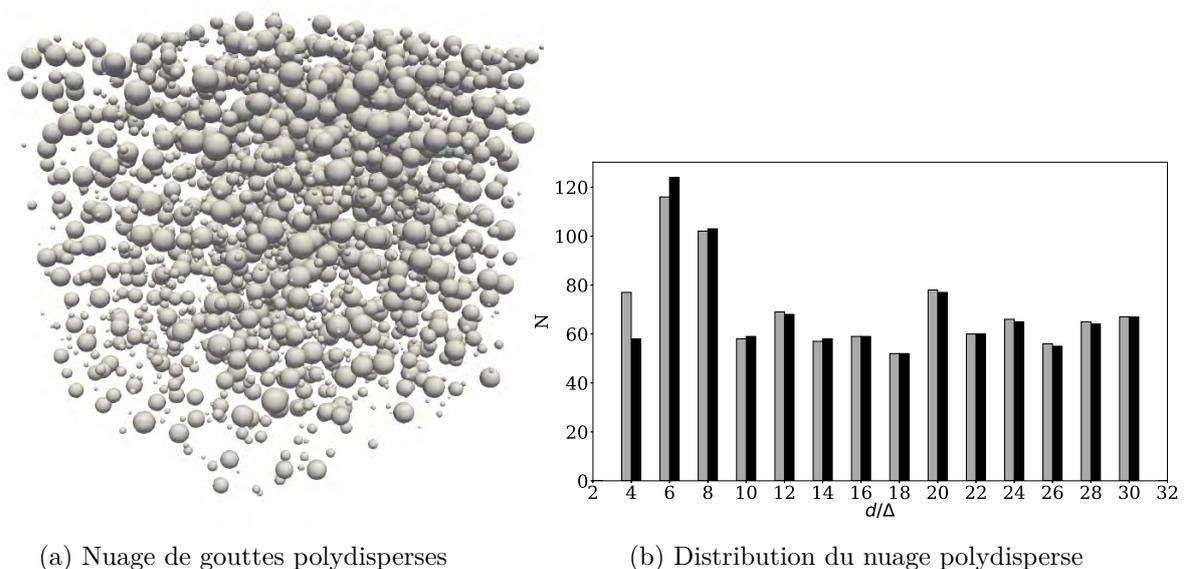


FIGURE 5.19. – Nuage de gouttes polydisperses et distribution associée.

La configuration numérique est identique à la précédente, section 5.5.2.1 et les résultats de la détection sont présentés Table 5.5 :

N_{init}	N_{detect}	$(d/\Delta)_{min}$	$(d/\Delta)_{max}$	ϵ_v (%)	ϵ_s (%)
2000	2000	4	31	0.27	0.29

TABLE 5.5. – Résultats de la détection liquide pour le nuage de gouttes polydisperses.

Le nombre de gouttelettes identifiées est identique à l’initial avec une grande précision concernant le volume et la surface calculés (ϵ_v et ϵ_s inférieurs à 0.3 %). Le nuage de gouttelettes simulé et la distribution qui en est issue soulignent que l’algorithme est bien adapté à la détection de structures liquides et garantissent la précision de ses résultats.

5.6. Performance

Dans cette section, les performances de l’algorithme de détection ont été testées. Ce dernier, inclus dans DYJEAT et ALGODETECT, Figure 5.1, n’a été utilisé que dans la dernière configuration pour plus de simplicité.

Tout d’abord, le temps d’exécution d’ALGODETECT a été analysé par rapport au temps moyen d’exécution du solveur DYJEAT (sans détection). Dans un second temps, sa scalabilité a été mise en valeur au-travers de l’analyse d’un large champ contenant une multitude de structures liquides.

5.6.1. Temps d’exécution

Le temps général d’exécution d’ALGODETECT et de ses différentes étapes a été normalisé par rapport à celui du solveur DYJEAT. Cette référence a été mesurée sur la simulation d’atomisation de nappe réaliste présentée par la suite dans la section 5.7, à partir d’une moyenne effectuée sur 1000 itérations. Enfin, le nombre de processeurs employés par ALGODETECT ainsi que leur charge (64^3 mailles dans chacun d’entre eux) sont identiques à la simulation DYJEAT analysée.

Les intervalles de temps obtenus par la fonction native MPI_Wtime sont présentés Table 5.6.

DYJEAT	ALGODETECT			
Total	Total	Initialisation	Détection	Autre
1	0.49	0.21	0.16	0.12

TABLE 5.6. – Temps d’exécution d’ALGODETECT normalisé par celui de DYJEAT.

Le temps d’exécution total d’ALGODETECT est approximativement la moitié du pas de temps moyen de DYJEAT. Parmi ses différentes étapes, l’initialisation regroupe la lecture des champs d’entrées, la reconstruction PLIC de l’interface et le calcul de ses propriétés géométriques pour une consommation de 42 % du temps d’exécution total. L’étape de détection ne coûte que 32 % et le reste, 24 %, est nécessaire à d’autres tâches (initialisation MPI, etc ...).

Cette détection s’étant déroulée sur un maillage et une répartition de processeurs identiques à la simulation, le temps de détection (16 % par rapport à DYJEAT) illustre directement le surcoût induit par la détection dans le solveur (pour une itération). Cependant, étant donné le nombre relativement important de pas de temps nécessaires pour faire évoluer de manière significative le champ liquide (condition CFL diphasique, Kang et al. [88]), le coût supplémentaire provoqué par la détection peut être considéré comme négligeable dans une simulation DNS complète.

5.6.2. Speedup

Dans cette section les performances parallèles d’ALGODETECT et plus particulièrement du module de détection sont évaluées sur les sorties binaires (format Enight) d’une simulation de DYJEAT. Ces dernières servent donc de support, de fichiers d’entrées, pour l’étude de scalabilité d’ALGODETECT.

Ces fichiers d’entrées sont tirés d’une simulation similaire à celle du nuage de gouttes polydisperses présenté section ???. Un large champ est construit en ajoutant des gouttes (N_{gt}) dans les trois directions, conduisant à une charge de travail uniforme pour tous les processeurs, Figure 5.19a. Les dimensions de cette simulation ainsi que sa discrétisation sont résumées Tables 5.7a et 5.7b.

L_x	L_y	L_z
1	1	1
m	m	m

(a) Dimensions du domaine

np_x	np_y	np_z	np_{tot}	N_{gt}
1280	1280	1280	$2 \cdot 10^9$	4000

(b) Discrétisation et nombre de goutte

TABLE 5.7. – Géométrie et maillage de la simulation servant de support à l’étude de scalabilité.

Les accélérations (speedup) d’ALGODETECT et de l’algorithme de détection sont visibles Figure 5.20. Ces dernières sont effectuées sur le domaine initial de la simulation, Table 5.7a, en conservant le même nombre de points, Table 5.7b, mais en les répartissant sur un nombre de processeurs croissant, Table 5.8.

$nproc_x$	$nproc_y$	$nproc_z$	$nproc_{tot}$
1	1	1	1
4	4	4	64
5	5	5	125
8	8	8	512
10	10	10	1000
16	16	16	4096

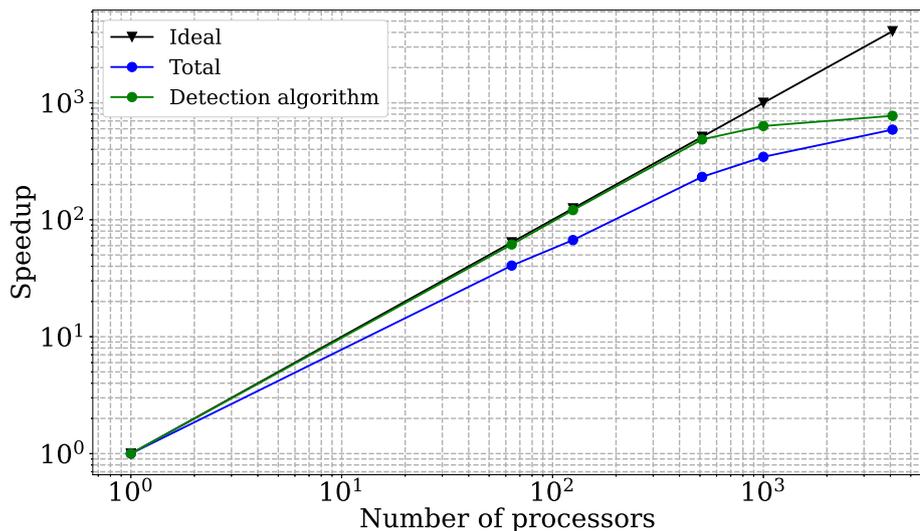
TABLE 5.8. – Répartitions des processeurs employés pour l’étude de scalabilité.

Cette accélération (Speedup) est calculée à partir d’un temps d’exécution séquentiel (t_{seq}) et d’un temps d’exécution parallèle (t_{para}) :

$$\text{Speedup} = t_{seq}/t_{para} \quad (5.17)$$

La courbe d’accélération d’ALGODETECT subit un ralentissement dès que le nombre de processeurs employé dépasse l’unité mais reste proche de la valeur idéale, du moins jusqu’à 1000 processeurs soit 128^3 mailles par domaine. Cela signifie que le temps de communication MPI global s’accroît en fonction du nombre de processeurs employé mais reste suffisamment faible pour que les gains de vitesse soient intéressants.

Ce constat est d’autant plus vrai pour l’algorithme de détection puisque son gain de vitesse est confondu avec l’accélération l’idéale, jusqu’à l’utilisation de 512 processeurs et s’aplatit très rapidement au-delà. Ce résultat illustre que les temps de communication MPI au sein de l’algorithme sont négligeables pour des chargements par processeurs élevés, mais deviennent très rapidement prédominants lorsque ces derniers diminuent.

FIGURE 5.20. – Courbes d'accélération pour 128^3 mailles par processeur.

5.7. Analyse d'un instant d'une simulation DNS d'atomisation assistée

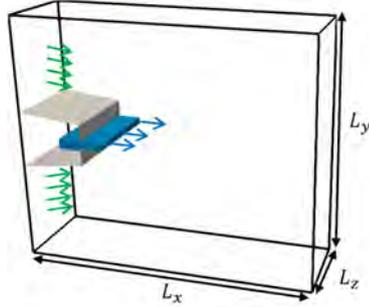
La détection et l'estimation des propriétés des structures liquides ont été validées avec succès sur les cas des tests décrits précédemment, sections 5.5.1 et 5.5.2. Dans cette section, une première analyse qualitative est menée sur un instant d'une simulation d'atomisation assistée. Cette dernière n'est que brièvement présentée dans cette section car une analyse plus poussée lui est consacrée dans le chapitre 8.

L'objectif de cette étude est de valider visuellement la classification des structures de types gouttes et ligaments présentes dans un champ liquide d'atomisation.

Le liquide est injecté à partir d'une fente rectangulaire de faible hauteur par rapport à sa largeur, Figure 5.21. Deux écoulements d'air à grande vitesse cisailent ce liquide entrant en lui fournissant l'énergie nécessaire à sa déstabilisation. L'atomisation globale se déroule en plusieurs étapes. La première intervient proche de l'injection liquide avec le développement d'instabilités longitudinales, (Rayana [144], Lozano et al. [107], Lozano et al. [108], Lozano et al. [109], Mansour and Chigier [112], Fuster et al. [61]), qui entraînent une oscillation sinusoïdale dans le sens de l'écoulement dite oscillation globale. Parallèlement à cela, des oscillations transverses apparaissent qui, à leur tour, engendrent la formation de ligaments et dans certains régimes des membranes (Stapper and Samuelsen [164], Fernández et al. [60]). Enfin, sous la combinaison de ces phénomènes, le liquide se fragmente en aval, périodiquement, et y génère de larges structures liquides. Cette étape termine le premier stade de la fragmentation liquide, dite atomisation primaire. Commence l'atomisation secondaire pour les structures liquides générées qui sont, à leur tour, affectées par le cisaillement de l'écoulement d'air. Ceci provoque une fragmentation continue de structures de plus en plus petites jusqu'au spray final (Mansour and Chigier [113], Larricq-Fourcade [95], Fernández [58], Dejean [45], Berthoumieu et al. [22]).

5.7.1. Configuration d'étude

L'instant analysé est issue d'une simulation DYJEAT de nappe liquide en configuration réaliste avec injecteur, Figure 5.21. Les nombres sans dimension reflétant le point de fonctionnement sont résumés Table 5.9.



Re_g	We	MFR
4954.1	11.52	0.75

FIGURE 5.21. – Configuration d'étude.

TABLE 5.9. – Nombres sans dimension.

La topologie d'écoulement attendue dans ces conditions correspond au régime d'atomisation ligamentaire "Stretched streamwise ligament" (Stapper and Samuelsen [164], Fernández [58]). Les structures liquides sont étirées dans le sens de l'écoulement pour former des ligaments et leurs ruptures engendrent de nouvelles gouttes. La détection de ce type de structures est donc nécessaire afin d'améliorer la compréhension de ce processus complexe.

La géométrie du domaine et le maillage employé ($170 \cdot 10^6$ mailles) sont résumés dans les Tables 5.10a et 5.10b.

α	L_x	L_y	L_z
300	34.46	34.46	3.84
μm	mm	mm	mm

(a) Dimensions du domaine

nproc _x	nproc _y	nproc _z	np _x	np _y	np _z	α/Δ
18	18	2	1152	1152	128	10

(b) Répartition des processeurs

TABLE 5.10. – Géométrie et maillage d'étude.

Une première comparaison de simulation DNS DYJEAT d'atomisation dans ce même régime ligamentaire a été réalisée par Zuzio et al. [185] uniquement pour déclencher une transition Eulérienne-Lagrangienne des gouttes.

5.7.2. Analyse qualitative des structures

Une simulation DNS diphasique permet d'obtenir des données qualitatives et quantitatives importantes sur la topologie et le comportement du liquide. Dans cette étude simplifiée, un seul instant d'une telle simulation est employé afin d'illustrer la catégorisation de structures mises en place.

Le champ liquide initial issu de DYJEAT illustre le processus d'atomisation précédemment décrit, Figure 5.22a. La présence des perturbations liquides longitudinales et transverses conduit à la formation de ligaments et de gouttes. Des larges structures se sont déjà détachées du corps de la nappe, sous l'effet de l'oscillation longitudinale périodique. Ces dernières subissent de nouvelles ruptures, se transforment en ligaments puis se stabilisent sous la forme de gouttes, avant de quitter le domaine de calcul.

Cet instant a été soumis à l'algorithme de détection liquide, via le code Fortran ALGODETECT. La base de données issue de cette opération a servi d'entrée à des scripts d'analyses Python. Ces derniers permettent de manier de larges bases de données et de communiquer les informations voulues, ici la classification des structures, dans un fichier au format lisible sous Paraview (et moins volumineux que les champs initiaux de DYJEAT). Les structures considérées

comme des gouttes ont une enveloppe rouge tandis que celles respectant les critères de classification des ligaments sont en vert, Figure 5.22b.

Cette visualisation démontre l'intérêt de la détection des structures liquides ainsi que la flexibilité d'analyse mise en place puisque la classification réalisée n'est soumise qu'à de simples scripts Python. De plus, la base de données générée par la détection liquide rend accessible des informations spécifiques à chaque structure, très intéressantes pour réaliser des analyses statistiques précises.



(a) Champ liquide issu de DYJEAT. (b) Gouttes (rouge) et ligaments (vert) détectés.

FIGURE 5.22. – Structures liquides présentes lors d'une atomisation ligamentaire.

L'algorithme de détection des structures liquides permet de constituer une base de données, plus simple et beaucoup moins volumineuse que les champs tridimensionnels complets issus des simulations. De telles bases de données possèdent des informations pertinentes et spécifiques à chaque structure, rendant accessible des analyses statistiques poussées sur des simulations complètes.

Avec l'aide de scripts Python, cette méthodologie ouvre des possibilités intéressantes telles que la reconstruction de trajectoires temporelles, l'amélioration de la connaissance du processus d'atomisation ainsi que de nouvelles représentations pertinentes, comme l'illustre la Figure 5.23.

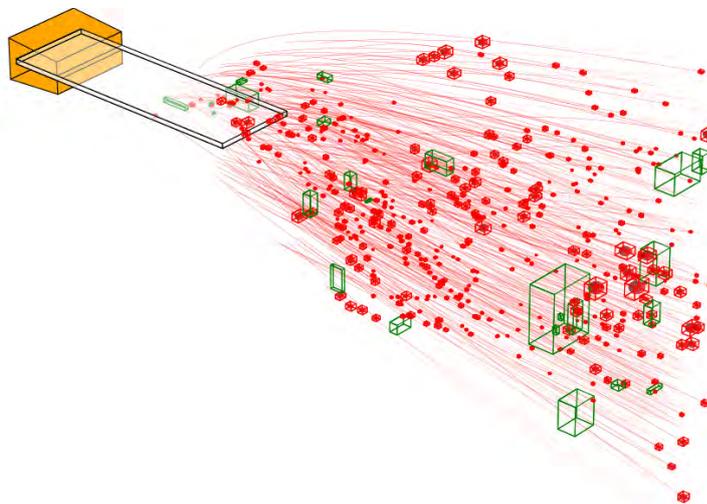


FIGURE 5.23. – Représentation Python des structures liquides présentes lors d'une atomisation ligamentaire.

Cette dernière est entièrement réalisée sous Python à partir de la base de données issue de la simulation précédemment utilisée, Figure 5.22. Les structures liquides de type gouttes et ligaments sont classifiées de la même manière tandis que l'injecteur et la nappe liquide sont représentés en fonction de leurs dimensions à l'instant d'analyse. Les trajectoires temporelles des gouttes sont ajoutées pour mettre en évidence le mouvement d'ensemble des gouttes. Cette dernière opération est réalisée grâce à la reconstruction Lagrangienne décrite plus tardivement, section 12.7.1.

5.8. Conclusion sur l'algorithme de détection liquide

L'objectif de ce chapitre était de présenter le nouvel algorithme de détection liquide implémenté dans les outils numériques DYJEAT et ALGODETECT ainsi que de valider son utilisation pour de futures simulations d'atomisations assistées. Développé dans l'idée de traiter les phénomènes complexes impliqués dans l'atomisation primaire, ce dernier a pour objectif d'aider à la compréhension de ce mécanisme, difficile à étudier expérimentalement, en particulier dans les zones très denses.

Cet algorithme s'inspire du fonctionnement des méthodes CCL, notamment ICL, mais dépasse leurs limitations concernant la distinction de structures rapprochées grâce à sa précision sous-maille (dû à la reconstruction PLIC de l'interface).

Des critères sur la topologie des structures détectées permettent de les classer en différentes catégories : gouttes, ligaments ou autres. L'implémentation MPI rend possible l'identification de structures sur de grands champs liquides, y compris des structures s'étendant sur plusieurs domaines (processeurs). Plusieurs critères de performances de l'algorithme ont été mesurés. Tout d'abord, son temps d'exécution qui s'est avéré largement inférieur (16 %) à celui d'un pas de temps moyen du code DNS DYJEAT. Ensuite, sa grande scalabilité a montré un gain de vitesse quasiment idéal jusqu'à un chargement de 128^3 cellules par processeur.

Enfin, cette détection liquide a été appliquée à un champ liquide provenant d'une simulation DNS réelle d'atomisation assistée. Cette dernière a été réalisée sur un champ liquide de $170 \cdot 10^6$ mailles pour un temps de calcul inférieur à une itération du solveur DNS.

L'aperçu visuel du champ liquide avec la classification des structures illustre tout l'intérêt de cette détection ainsi que les possibilités d'analyses. D'autre part, l'application répétée de cette détection permet de reconstruire l'historique de formation des structures (gouttes, ligaments, autres), leurs trajectoires, et augmentent ainsi les informations exploitables de la simulation.

La détection de liquide et son analyse sont des outils très efficaces et prometteurs pour une meilleure compréhension des mécanismes d'atomisations et, in fine, leurs modélisations.

Troisième partie

Similitude par rapport à l'expérience et géométries

Objectifs, contexte expérimental et méthodologie de similitude

Ce chapitre introductif présente l'objectif général de cette thèse ainsi que quelques points clefs nécessaires à sa bonne compréhension. Tout d'abord, le contexte expérimental de cette étude est décrit avec les hypothèses et simplifications qui y sont associées. Par la suite, seuls certains points de fonctionnements expérimentaux sont retenus, formant une base de données initiale, dont le but est de servir de support aux simulations numériques. Enfin, la méthodologie de similitude employée par les simulations numériques est illustrée. Cette dernière permet de conserver des nombres sans dimension par rapport aux points d'expériences cités précédemment et démontre ainsi leurs effets sur le processus d'atomisation.

Sommaire

6.1. Objectifs des simulations numériques	110
6.2. Contexte expérimental	111
6.3. Points de fonctionnements et mesures d'expériences	112
6.4. Méthodologie de similitude	114

6.1. Objectifs des simulations numériques

Le premier objectif de cette étude est de reproduire, puis d'étudier, aux moyens de nombres sans dimension, les phénomènes présents lors de l'atomisation assistée d'une nappe liquide, en régime appelé en "stretched ligament breakup regime". En effet, ce dernier est particulièrement adapté à des applications de type combustion puisque la génération et l'atomisation des ligaments génèrent principalement des petites gouttes avec une longueur de rupture de nappe faible, Figure 6.1.



FIGURE 6.1. – Processus d'atomisation ligamentaire d'une nappe liquide plane, Fernández [58].

Afin d'atteindre cet objectif, l'étude suivante s'appuie sur les travaux de Fernández [58] et Dejean [45] et leurs bases de données expérimentales. Ces derniers, ont réussi à reproduire ce type de fragmentation ligamentaire sur le banc expérimental SHAPE de l'ONERA, Figure 6.2.

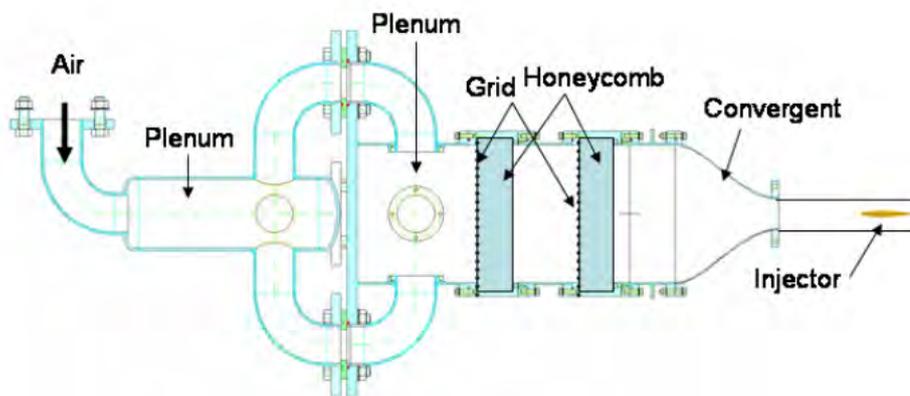


FIGURE 6.2. – Représentation schématique du banc d'essai SHAPE, Dejean [45].

Grâce à ces nouvelles simulations d'atomisations ligamentaires, une nouvelle modélisation LES de l'atomisation est accessible en se basant sur les approches à aire interfaciale de Vallet [172], Lebas [99] et Chesnel [35].

Plus précisément, de nouvelles fermetures des paramètres fondamentaux de ce modèle section 3.3.4, notamment le temps caractéristique et le nombre de Weber à l'équilibre, sont disponibles par une nouvelle approche phénoménologique. Cette dernière se base sur l'utilisation de bases de données générées par la détection et l'analyse des structures liquides produites durant les processus d'atomisations, Figure 6.3.

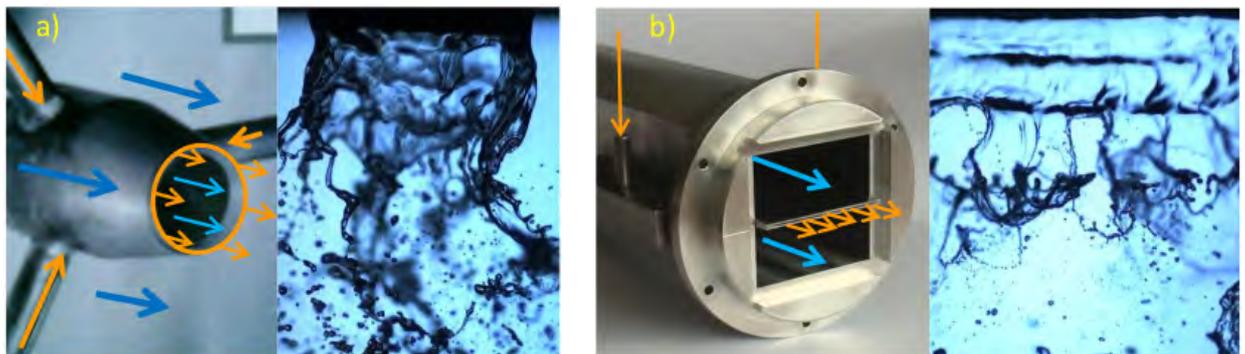


FIGURE 6.3. – Détection des structures liquides générées durant une simulation d’atomisation.

6.2. Contexte expérimental

Une grande partie des injecteurs aéronautiques industriels utilisent des dispositifs produisant des nappes liquides annulaires. Ce type de configuration matérielle implique des protocoles de mesures complexes et difficiles à réaliser. Pour cette raison, une configuration simplifiée mais pertinente est préférée dans ce cadre de recherche, celui d’une nappe liquide plane.

Les travaux de Dumouchel and Chigier [53] ainsi que Berthoumieu and Lavergne [21] ont démontré la similarité comportementale entre une nappe annulaire et une nappe plane, sous certaines conditions géométriques. En effet, lorsque le ratio du rayon de l’injecteur annulaire sur son épaisseur de nappe est très grand devant l’unité, les déstabilisations présentes lors de l’atomisation sont analogues, Figure 6.4. Pour cette raison, la configuration simplifiée de nappe plane est préférée pour la suite de cette étude.



(a) Injecteur annulaire.

(b) Injecteur plan.

FIGURE 6.4. – Analogie entre les types d’injecteurs, Fernández [58].

Dans ce contexte, le banc SHAPE fut conçu au sein de l'ONERA pour approfondir la compréhension et le contrôle des mécanismes à l'origine de l'atomisation assistée de telles nappes, Figures 6.2 et 6.5. Les travaux expérimentaux de Lalo [94], Larricq-Fourcade [95], Fernández [58], Boukra [28] et Dejean [45] sur ce banc illustrent la volonté ainsi que les efforts de l'ONERA réalisés dans ce domaine.

D'autre part, le banc expérimental SHAPE fut conçu pour étudier les nappes liquides dont l'épaisseur est très faible devant leurs largeurs transversales. Ce point caractéristique du dispositif expérimental permet de considérer que les effets de bord n'affectent pas le comportement global de la nappe.

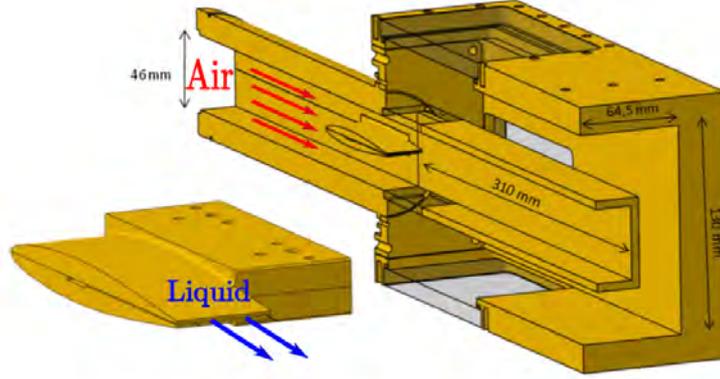


FIGURE 6.5. – Schématisation de la veine d'air et du profil NACA de l'injecteur du banc SHAPE, Marter-Lagrange [116].

6.3. Points de fonctionnements et mesures d'expériences

Les points de fonctionnements employés par Dejean [45] permettant d'atteindre un régime de fragmentation ligamentaire sont résumés ci-dessous, Table 6.1. Ces derniers sont proches de ceux retrouvés dans le domaine de la propulsion aéronautique civile.

ρ_g	U_g	μ_g	ρ_l	U_l	μ_l	σ
	50					
1.2	60	$1.8 \cdot 10^{-5}$	10^3	2	10^{-3}	$7.2 \cdot 10^{-2}$
	70					
kg/m ³	m/s	Pa s	kg/m ³	m/s	Pa s	N/m

TABLE 6.1. – Conditions expérimentales de Dejean [45].

À partir de ces valeurs dimensionnelles, la construction de plusieurs nombres adimensionnels caractéristiques est possible, notamment ceux habituellement utilisés dans l'étude de l'atomisation assistée. Pour cela, l'ensemble des paramètres suivants sont utilisés :

$$\rho_g, U_g, \mu_g, \rho_l, U_l, \mu_l, \sigma, \delta_{cl}, \alpha$$

Les trois premiers sont liés aux propriétés du gaz : densité, vitesse et viscosité dynamique (ρ_g, U_g, μ_g). La phase liquide est caractérisée par sa densité, sa vitesse, sa viscosité dynamique et sa tension de surface ($\rho_l, U_l, \mu_l, \sigma$). Les grandeurs géométriques, δ_{cl} et α , représentent respectivement l'épaisseur initiale de couche limite du gaz et l'épaisseur initiale de la nappe liquide.

À partir de ces paramètres initiaux une liste pertinente de nombres sans dimension est employée afin de représenter ce processus d'atomisation.

- $Re_l = \frac{\rho_l U_l \alpha}{\mu_l}$ Force d'inertie liquide/Force de viscosité liquide
- $Re_g = \frac{\rho_g U_g \delta_{cl}}{\mu_g}$ Force d'inertie gaz/Force de viscosité gaz
- $We = \frac{\rho_g (U_g - U_l)^2 \alpha}{\sigma}$ Force d'inertie relative/Tension de surface
- $\hat{\mu} = \frac{\mu_g}{\mu_l}$ Rapport des viscosités dynamiques des phases
- $\hat{\rho} = \frac{\rho_g}{\rho_l}$ Rapport des densités des phases
- $MFR = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2}$ Rapport des flux de quantités de mouvements des phases

Les valeurs de ces derniers, associées aux points de fonctionnements de Dejean [45] et Fernández [58] Table 6.1, sont résumées ci-dessous.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
		2066.6	11.52		0.75
$1.2 \cdot 10^{-3}$	598.8	2200.0	16.82	$1.796 \cdot 10^{-2}$	1.08
		2506.6	23.12		1.47

TABLE 6.2. – Nombres sans dimension retenus des travaux Dejean [45].

Ainsi la Table 6.2 renseigne donc un ensemble de nombres sans dimension caractérisant le régime d'atomisation ligamentaire.

L'objectif initial étant de reproduire une atomisation ligamentaire aux moyens de nombres sans dimension, la Table 6.2 représente donc des états initiaux d'écoulements qui doivent être conservés au maximum.

Cependant, le champ d'investigation de ces nombres sans dimension est trop important, c'est pourquoi certains paramètres liés à la phase liquide ont été fixés. La densité et la viscosité dynamique de la phase liquide (ρ_l , μ_l) ainsi que la vitesse initiale du liquide (U_l) et son épaisseur (α) restent identiques à ceux issus des travaux de Dejean [45], c'est-à-dire de l'eau à température et pression ambiante.

ρ_l	μ_l	U_l	α
10^3	$1.002 \cdot 10^{-3}$	2	300
kg/m ³	Pas	m/s	µm

TABLE 6.3. – Conditions initiales liquide et géométrique constantes.

Enfin, les diamètres de Sauter relevés par Dejean [45] sont présentés Table 6.4. Ces données servent de référence et de points de comparaison avec les mesures effectuées par la suite dans les simulations.

$MFR-We$	0.75-11.52	1.08-16.82	1.47-23.12
d_{32} (µm)	215	162	136

TABLE 6.4. – Mesures du diamètre de Sauter en fonction des couples $MFR-We$ par Dejean [45].

6.4. Méthodologie de similitude

Afin de conserver une atomisation ligamentaire dans les prochaines simulations, une adaptation des conditions initiales a été réalisée en se basant sur une similitude des nombres sans dimension. Ces derniers sont renseignés Table 6.2 et constituent une base de référence que les futures simulations ont partiellement conservé.

La première étape dans la mise en place de cette similitude fut de fixer le rapport des densités, $\hat{\rho}$, à une valeur supérieure à celle de référence (Table 6.1). Cette dernière fut multipliée par dix dans toutes les études présentées hormis lorsque son influence sur le processus d'atomisation fut investiguée. Cette modification est intéressante pour deux raisons principales. Tout d'abord, dans un contexte d'étude aéronautique, les chambres de combustions fonctionnent majoritairement avec de l'air pressurisé, souvent à 10 bar. De plus, cette augmentation induit une meilleure robustesse des simulations numériques ainsi que des temps caractéristiques des phénomènes plus rapides.

Cette augmentation du rapport des densités complexifie la conservation des nombres sans dimension restants. En effet, ces derniers ne sont pas tous indépendants, des couplages internes limitent le nombre pouvant être maintenu constant. Pour cette raison, seuls les plus pertinents, influençant le processus d'atomisation furent prioritairement conservés.

Le premier d'entre eux est le rapport des flux de quantités de mouvements, MFR , que Fernández [58] et Dejean [45] ont employé dans leurs travaux sur les régimes de classifications d'atomisations de nappes. Par la suite, le Weber fut conservé puisque ce dernier pilote la production de surface au travers de granulométrie du spray. Si le processus de fragmentation se déroule correctement, certaines caractéristiques du spray pourront être comparées aux travaux expérimentaux. Enfin, le rapport des viscosités dynamiques est maintenu constant par la suite pour ne pas influencer le cisaillement entre les deux phases. C'est au-travers de ce phénomène que s'effectue le transfert d'énergie de la phase gazeuse à celle liquide, dans cette configuration d'atomisation assistée de type airblast.

Ainsi, grâce à la conservation des propriétés du liquide (Table 6.3), les conditions initiales deviennent accessibles à partir des nombres sans dimension voulus. Pour réaliser cela, les équations suivantes doivent être employées dans l'ordre suivant :

$$\rho_g = \hat{\rho}\rho_l \quad (6.1)$$

$$U_g = \sqrt{MFR \frac{U_l^2}{\hat{\rho}}} \quad (6.2)$$

$$\sigma = \frac{\rho_g(U_g - U_l)^2 \alpha}{We} \quad (6.3)$$

$$\mu_g = \hat{\mu}\mu_l \quad (6.4)$$

Cette méthodologie permet de maintenir la plupart des nombres sans dimension à leurs valeurs voulues, $\hat{\rho}$, MFR , We et $\hat{\mu}$. Toutefois, les dépendances existantes entre certains de ces nombres fixent la valeur du Reynolds gazeux, Re_g .

Grâce à cela, une étude en similitude par rapport aux expériences de Dejean [45] peut être réalisée afin de déterminer si seuls les nombres sans dimension permettent de reproduire un type d'atomisation ligamentaire.

De plus, cette méthodologie permet d'envisager des études d'influences découplées pour chacun de ces nombres et ainsi enrichir les analyses expérimentales. En effet, ces dernières ne réalisent que difficilement de telles études à cause des dépendances entre ces nombres. Les points de fonctionnements de Dejean [45] en sont l'exemple (Tables 6.1 et 6.2) avec l'augmentation du débit d'air, de la vitesse gaz U_g , qui influence simultanément le MFR , le We et le Re_g . Ainsi, cette approche complémentaire à l'expérience peut permettre d'identifier et d'associer à certains de ces nombres sans dimension des phénomènes se produisant lors des processus d'atomisation.

Résultats antérieurs et configurations géométriques

Ce chapitre présente les résultats et validations antérieurs employés dans les deux configurations géométriques utilisées. Ces dernières sont présentées en citant leurs intérêts pour la simulation d'atomisation assistée, leurs caractéristiques géométriques ainsi que leurs conditions limites associées.

Sommaire

7.1. Résultats et validations antérieurs	116
7.2. Géométrie du domaine périodique	116
7.3. Géométrie du domaine réaliste	118

7.1. Résultats et validations antérieurs

L'établissement du profil de la vitesse gazeuse s'appuie sur les résultats numériques de Marter-Lagrange [116] ainsi que ceux expérimentaux de Dejean [45].

Ce dernier mesura et caractérisa le profil de l'écoulement gazeux par la technique du fil chaud dans plusieurs configurations d'études, turbulente comme laminaire. Toutefois, les essais et résultats de Dejean [45] sont plus nombreux dans la dernière des configurations car plus simple à réaliser en s'affranchissant des contraintes de la turbulence.

De son côté, Marter-Lagrange [116] réalisa des simulations monophasiques avec le solveur DY-JEAT à partir des points de fonctionnements laminaires de Dejean [45]. Son objectif était de simuler et de valider le champ gazeux reproduit dans la veine d'air. Pour cela, plusieurs relevés du champ de vitesses furent réalisés à des distances équivalentes à celles de l'expérience. Le bon accord entre ces deux relevés, numérique comme expérimental, valide la capacité du code numérique à reproduire un tel écoulement laminaire, Figure 7.1.

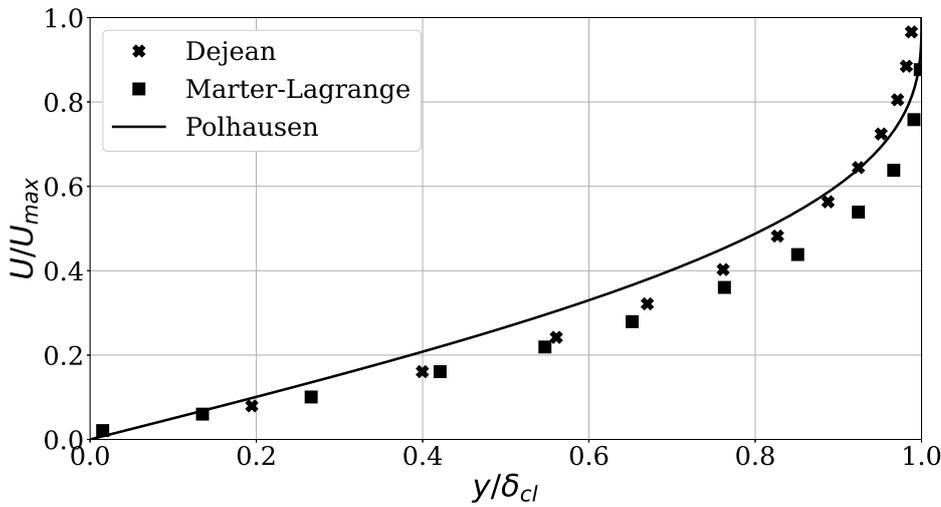


FIGURE 7.1. – Évolution du profil de vitesse, relevé de Dejean [45], relevé de Marter-Lagrange [116] et modélisation laminaire de Polhausen.

D'autre part, ce profil de vitesse est correctement modélisé par la solution polynomiale de Polhausen des équations de Prandtl dans la couche limite gazeuse, notée ici δ_{cl} .

$$U(\zeta) = U_g \left[2\zeta - 2\zeta^3 + \zeta^4 \right] \quad \zeta = \frac{y}{\delta_{cl}} \quad (7.1)$$

En dehors de cette couche limite, δ_{cl} , la vitesse du gaz est constante et égale à U_g .

De plus, un profil de vitesse liquide parabolique est employé dans les simulations numériques afin d'être le plus représentatif possible des conditions expérimentales.

$$U(\zeta) = \frac{3}{2}U_l \left[1 - \zeta^2 \right] \quad \zeta = \frac{2y}{\alpha} \quad (7.2)$$

Ces deux modélisations, du profil de vitesse gaz et liquide, sont transposées dans chacune des configurations géométriques employées par la suite.

7.2. Géométrie du domaine périodique

La première configuration employée reproduit l'atomisation d'une nappe liquide cisailée dans un domaine périodique. Bien que simplifiée par rapport à l'expérience, cette dernière reste pertinente avec la possibilité de reproduire la majorité des phénomènes physiques souhaités. En effet, cette configuration peut être vue comme le suivi spatial d'une longueur d'onde appartenant à une nappe oscillante se désintégrant.

De plus, cette configuration numérique permet d'effectuer des simulations d'atomisations de haute fidélité et pour un coût fortement réduit par rapport à une simulation prenant en compte un injecteur complet. D'autre part, cette réduction de coût permettra de simuler plusieurs points de fonctionnement et établira des études paramétriques en fonction des nombres sans dimension initiaux.

Pour réaliser cela, une nappe liquide d'épaisseur α est cisailée par deux courants d'air à haute vitesse dans un parallélépipède rectangle de dimensions L_x , L_y et L_z . La condition initiale mime la présence d'une lèvres séparatrice d'épaisseur ϵ entre la phase liquide et gazeuse.

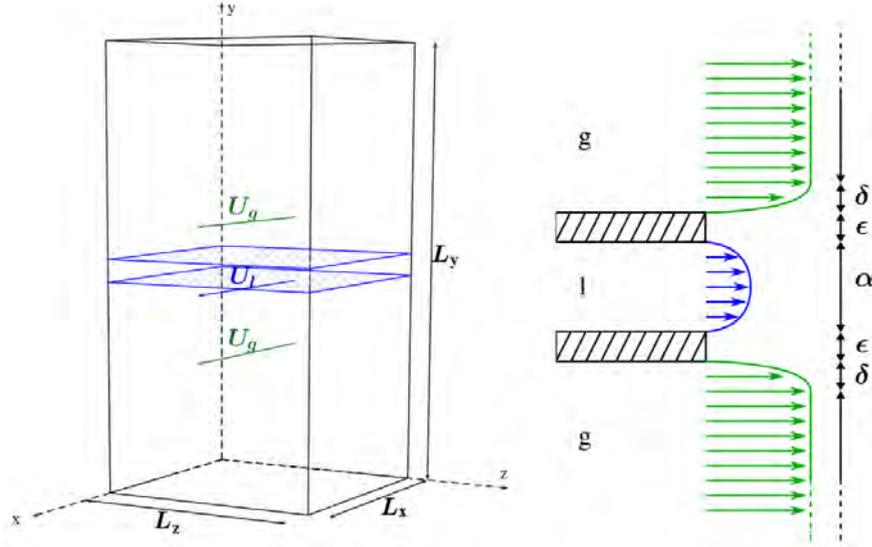


FIGURE 7.2. – Schématisation d'une nappe liquide au sein d'un domaine périodique.

Parmi les paramètres géométriques figés par la suite figure l'épaisseur de nappe, α , conformément aux expériences de Dejean [45], l'épaisseur initiale de la lèvres séparatrice, ϵ , ainsi que l'épaisseur initiale de couche limite δ_{cl} .

α	δ_{cl}	ϵ
300	150	150
μm	μm	μm

TABLE 7.1. – Paramètres géométriques fixes en configuration périodique.

Ainsi, le volume de la nappe ainsi que sa surface sont déduits de ces considérations géométriques.

$$V_l \text{ init} = \alpha L_x L_z \quad (7.3)$$

$$S_l \text{ init} = 2(L_x L_z + \alpha L_x + \alpha L_z) \quad (7.4)$$

Les profils de vitesses gaz et liquide initiaux reprennent ceux obtenus à partir des résultats d'études de Marter-Lagrange [116] et Dejean [45], équations (7.1) et (7.2).

Afin de déclencher rapidement les instabilités longitudinales et transverses, une perturbation de vitesse initiale a été mise en place. Cette excitation se décompose en une partie longitudinale et transversale présente dans le liquide.

$$U'(x, y, z) = U_l \left[C_x \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda_x}\right) + C_z \sin\left(\frac{2\pi z}{\lambda_z}\right) \right] e^{-\frac{4y}{\alpha}} \quad (7.5)$$

Avec λ_x et λ_z les longueurs d'ondes initiales d'excitation dans la direction longitudinale et

transverse.

Enfin, toutes les simulations utilisant ce domaine géométrique n'emploient que des conditions limites périodiques. Plus de détails sur ces dernières sont présents section 4.5.

7.3. Géométrie du domaine réaliste

La seconde configuration employée se rapproche du dispositif expérimental SHAPE avec une injection d'air et de liquide ainsi qu'une condition de sortie simple. Contrairement à la géométrie précédente, cette configuration permet de reproduire une atomisation complète du liquide beaucoup plus fidèlement à l'expérience, avec la prise en compte plus ou moins complète d'un injecteur. Pour réaliser cela, un domaine de calcul parallélépipédique de dimensions L_x , L_y et L_z est employé, avec une nappe liquide d'épaisseur α , Figure 7.3.

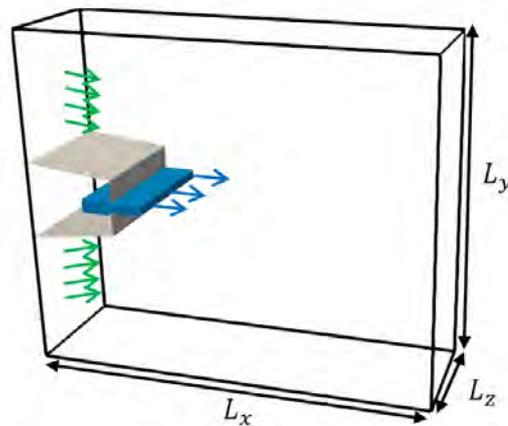


FIGURE 7.3. – Schématisation d'une atomisation de nappe liquide plan avec injecteur.

L'injecteur du banc SHAPE possède un profil NACA 63-010 avec un bord de fuite tronqué. En raison de temps de calcul et de coûts numériques prohibitifs, seule une partie de ce dernier est prise en compte dans les simulations dont la longueur simulée est notée L . Les parois de cet injecteur sont simulées au moyen d'interfaces immergées présentes dans le code DYJEAT, développées par Marter-Lagrange [116], Figure 7.4.

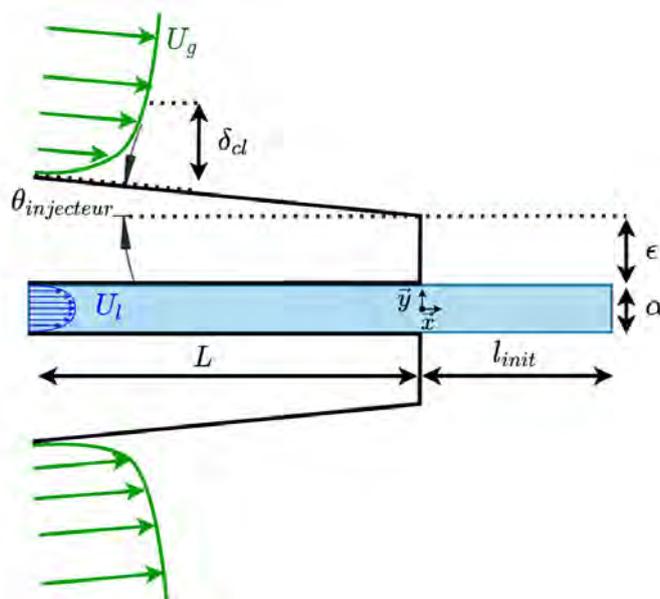


FIGURE 7.4. – Profils de vitesses et dimensions de l'injecteur.

Pour cette configuration numérique, les paramètres géométriques de l'injecteur ont été conservés par rapport à l'expérience, L et $\theta_{injecteur}$. De plus, l'épaisseur de la nappe α , l'épaisseur de couche limite δ_{cl} ainsi que la lèvre séparatrice ϵ sont conservées, conformément au dispositif expérimental de Dejean [45]. Par ailleurs, la nappe débitante est initialisée en sortie d'injecteur à une longueur l_{init} afin d'accélérer le début du processus d'atomisation.

α	δ_{cl}	ϵ	L	l_{init}	$\theta_{injecteur}$
300	470	850	2.8	0.5	6
μm	μm	μm	mm	mm	°

TABLE 7.2. – Paramètres géométriques fixes configuration plan.

Ainsi, le volume liquide initial de la nappe débitante ainsi que sa surface sont déduits de ces considérations géométriques.

$$V_{l_{init}} = \alpha L_z (L + l_{init}) \quad (7.6)$$

$$S_{l_{init}} = 2 [L_z (L + l_{init}) + \alpha L_z + \alpha (L + l_{init})] \quad (7.7)$$

Les conditions d'injection du gaz et du liquide conservent les profils établis à partir des résultats d'études de Marter-Lagrange [116] et Dejean [45], équations (7.1) et (7.2).

Enfin, l'ensemble des simulations de nappe réaliste utilise la même répartition de conditions limites. La direction longitudinale (\vec{x}) se voit affecter d'une condition limite d'injection (pour le liquide et l'écoulement d'air) et une condition de sortie à l'opposé. Toutes les autres directions, (\vec{y} , \vec{z}), ont des conditions de glissements. Plus de détails sur ces dernières sont présents dans la section 4.5.

Quatrième partie

Simulations et analyses de nappes liquides cisillées dans un domaine périodique

Introduction au déroulement de l'étude des nappes liquides cisailées dans un domaine périodique

Ce chapitre présente et résume les différents travaux effectués dans le cadre de l'atomisation de nappes liquides dans un domaine périodique.

L'étude commence par la simulation et l'analyse d'un point de fonctionnement désigné comme référence. Ce dernier est extrait de la base de données de Dejean [45] et correspond au cas de plus basse vitesse ($U_g = 50$ m/s). Plus précisément, grâce à la méthodologie de similitude décrite section 6.4, ce sont les nombres sans dimension associés à ce point de fonctionnement qui sont conservés. Cela permet de déterminer si ces nombres seuls permettent de reproduire une atomisation ligamentaire dans cette configuration géométrique, chapitre 8.

Le chapitre suivant s'intéresse à l'impact des variations des paramètres géométriques sur le processus d'atomisation ainsi que sur la représentativité des simulations par rapport à l'expérience. L'objectif est d'estimer une hauteur de domaine ainsi qu'une taille de maille ne pénalisant pas, ou le moins possible, cette représentativité en vue d'une comparaison quantitative avec l'expérience, chapitre 9.

Le point d'étude suivant compare les simulations effectuées à partir des nombres sans dimension des expériences de Dejean [45] et ses propres résultats expérimentaux. L'objectif de cette étude est de retrouver des variations comportementales du processus d'atomisation et des diamètres caractéristiques en accord avec les résultats d'expériences.

Cependant, cette étude en similitude conserve la dépendance existante entre ces nombres et ne permet pas d'identifier clairement la contribution, l'effet, de chacun d'entre eux sur le processus d'atomisation. En effet, comme l'illustre les travaux de Dejean [45], le changement du débit d'air, de la vitesse gaz, influence les valeurs du Weber, du Reynolds gazeux et du *MFR*. Pour cette raison, avec l'aide de la méthodologie de similitude décrite section 6.4, une nouvelle étude paramétrique a été effectuée. Cette dernière s'appuie sur les nombres sans dimension de cette base de données et a pour objectif d'analyser l'influence séparée des nombres sans dimension les plus pertinents, chapitre 10.

Le dernier chapitre se concentre sur le paramétrage d'un modèle d'atomisation LES. Tout d'abord, l'accent est mis sur l'établissement de corrélations comportementales à partir de l'ensemble des observations des chapitres précédents. En effet, une première catégorisation de l'influence des nombres sans dimension est effectuée dans le cadre de cette étude de nappe périodique. À partir de cela, une modélisation LES de l'atomisation basée sur les approches à aire interfaciale de Vallet [172], Lebas [99] et Chesnel [35] est effectuée. Plus particulièrement, des fermetures pour les paramètres fondamentaux de ce modèle, notamment le temps caractéristique et le nombre de Weber à l'équilibre, sont proposées par une approche phénoménologique, chapitre 11.

Simulation et analyse du cas de référence

L'objectif de ce chapitre est de démontrer la faisabilité et la représentativité d'une atomisation ligamentaire en configuration périodique grâce à la conservation de nombres sans dimension pertinents. Pour cela, le processus d'atomisation obtenu pour le cas de référence est inspecté avec une analyse qualitative et quantitative qui permet de juger la qualité de ce dernier.

Tout d'abord, l'utilisation de conditions périodiques impose un choix sur les dimensions géométriques de la simulation. Dans cette étude, ces dernières L_x et L_z sont choisies comme étant proportionnelles aux longueurs d'ondes des modes les plus amplifiés des directions \vec{x} et \vec{z} , notées ici λ_{ax} et λ_{tz} . Ces longueurs d'ondes sont estimées à partir des corrélations de stabilité linéaire ainsi que des résultats d'expériences, section 8.1.

De plus, les nombres sans dimensions conservés afin de reproduire une atomisation de type ligamentaire ainsi que les conditions initiales obtenues par la méthodologie de similitude sont présentés section 8.2.

Le maillage retenu ainsi que le domaine géométrique, adapté aux longueurs d'ondes choisies, est décrit section 8.3.

Une normalisation temporelle est proposée afin de comparer les différents processus d'atomisation. Cette dernière se base sur l'utilisation des nombres sans dimension initiaux afin d'être utilisable et transposable dans plusieurs points de fonctionnement, section 8.4.

Enfin une analyse qualitative et quantitative du processus d'atomisation est effectuée afin de statuer sur sa cohérence et sa représentativité avec le résultat ligamentaire voulu. Cette dernière commence par l'observation des différentes étapes de l'atomisation reproduite, section 8.5, et se termine par une mesure de ses caractéristiques, section 8.6 et 8.7.

Sommaire

8.1. Choix des longueurs d'ondes	126
8.1.1. Longueur d'onde longitudinale	126
8.1.2. Longueur d'onde transverse	127
8.2. Nombres sans dimension et conditions initiales	128
8.3. Géométrie et maillage	128
8.4. Temps caractéristique	129
8.5. Observations du processus d'atomisation	129
8.6. Caractéristiques de l'atomisation	131
8.6.1. Indicateurs globaux	131
8.6.2. Indicateurs locaux	133
8.7. Diamètre caractéristique	134
8.8. Conclusion de l'étude du cas de référence	135

8.1. Choix des longueurs d'ondes

Une perturbation de vitesse est mise en place pour accélérer le processus d'atomisation en fonction d'une longueur d'onde longitudinale et transverse, équation (8.3). De cette manière, le liquide doit se fragmenter suivant le mode le plus amplifié dans ces deux directions. Pour cette raison, une estimation de ces deux paramètres a été réalisée à partir de résultats d'analyse de stabilité linéaire et d'expériences.

8.1.1. Longueur d'onde longitudinale

La majorité des expériences en atomisation mettent l'accent sur la forte relation entre la longueur d'onde longitudinale mesurée et le régime d'atomisation. Pour cette raison, une analyse et un dimensionnement supplémentaire de cette grandeur ont été réalisés à partir des expériences retenues de Dejean [45].

Parmi les deux méthodes existantes pour dimensionner cette longueur d'onde, la première s'inspire des travaux expérimentaux de Raynal [146], décrit section 2.1.1.1. La modélisation qui découle de son étude repose sur la dérivé du profil de vitesse gaz, l'épaisseur de vorticit  et le rapport des densit s liquide gaz,  quations (2.4), (2.5) et (2.6). Gr ce   cela, une estimation du param tre initial, λ_{ax} , est possible.

$$\frac{\partial U_g(y)}{\partial y} = \frac{U_g}{\delta_{cl}} \left[2 - 6 \frac{y}{\delta_{cl}} + 4 \frac{y^2}{\delta_{cl}^2} \right] \quad \delta_\omega = \frac{U_g - U_l}{\left. \frac{\partial U_g(y)}{\partial y} \right|_{\max}} \quad \lambda_{ax} = CD \delta_\omega \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad (8.1)$$

Cette premi re m thode fut reprise et am lior e plusieurs fois via des  tudes exp rimentales qui ajust rent le coefficient D en fonction des leurs dispositifs, Marmottant and Villermaux [115], Rayana [144] et Larricq-Fourcade [95].

La seconde m thode ne s'inspire pas de r sultats d'analyses de stabilit s lin aires mais s'appuie exclusivement sur des r sultats exp rimentaux, Lozano et al. [108]. Cette m thodologie repose sur le calcul d'une quantit  de mouvements,  tablis   partir de l' paisseur des canaux du dispositif exp rimental (d_g et d_l).

$$MR = \frac{\rho_g U_g^2 d_g}{\rho_l U_l^2 d_l} \quad (8.2)$$

Ce rapport de quantit  de mouvements permet de d duire une nouvelle expression pour la longueur d'onde longitudinale.

$$\lambda_{ax} = k \frac{\sqrt{d_l d_g}}{\sqrt{MR}} \quad (8.3)$$

Le coefficient k est fix    20.39 dans l' tude de Lozano et al. [108] pour  tre le plus ad quat avec leurs r sultats exp rimentaux. Par la suite, Fern ndez [58] utilisa cette approche et obtint de meilleurs r sultats avec $k = 16.4$.

Les diff rentes approches cit es avec leurs formulations associ es sont r sum es ci dessous dans la Table 8.1.

	Raynal [146]	Marmottant and Villermaux [115]	Lozano et al. [108]	Fern�ndez [58]
λ_{ax}	$\frac{2\pi}{1.5} \delta_\omega \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}$	$0.4 \frac{2\pi}{1.5} \delta_\omega \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}$	$20.39 \frac{\sqrt{d_l d_g}}{\sqrt{MR}}$	$16.4 \frac{\sqrt{d_l d_g}}{\sqrt{MR}}$

TABLE 8.1. – Mod lisations pour la longueur d'onde axiale.

La corr lation de la longueur d'onde qu'utilisent Lozano et al. [108] et Fern ndez [58],  quation (8.3), s'exprime  galement en fonction du param tre MFR :

$$\lambda_{ax} = k \frac{\sqrt{d_l d_g}}{\sqrt{MR}} = k \frac{\sqrt{d_l d_g}}{\sqrt{MFR \frac{d_g}{d_l}}} = k d_l MFR^{-\frac{1}{2}} \quad (8.4)$$

Sachant que le canal débitant du liquide, d_l , est représenté par l'épaisseur de nappe liquide initiale, α .

L'estimation de λ_{ax} se base sur le cas de référence, c'est-à-dire le point de fonctionnement correspondant à la plus basse des vitesses gaz, $U_g = 50$ m/s, cité Table 6.1. Les paramètres initiaux nécessaires aux différentes formulations (ρ_g , ρ_l , δ_ω) sont déduits de ce même point de fonctionnement. De plus, l'épaisseur de couche limite, nécessaire à l'estimation de l'épaisseur de vortécité, est égale à la demie épaisseur de la nappe liquide, $\delta_{cl} = \alpha/2$.

Les estimations de λ_{ax} réalisées pour ce point de fonctionnement sont résumés ci-dessous, dans la Table 8.2.

	Raynal [146]	Marmottant and Villermaux [115]	Lozano et al. [108]	Fernández [58]
λ_{ax} (mm)	7.6	2.9	7.06	5.7

TABLE 8.2. – Estimations de la longueur d'onde axiale.

La grande disparité des résultats entre les essais coaxiaux de Marmottant and Villermaux [115] et ceux plans de Lozano et al. [108] et Fernández [58] provient de l'ajustement des coefficients, D et k , à leurs dispositifs expérimentaux.

La valeur de longueur d'onde longitudinale retenue par la suite est un compromis entre celles trouvées par Fernández [58] et Lozano et al. [108] puisque leurs dispositifs expérimentaux sont les plus proches de la géométrie choisie pour les simulations périodiques.

$$\lambda_{ax} = 6 \text{ mm} \quad (8.5)$$

8.1.2. Longueur d'onde transverse

La longueur d'onde transverse conditionne la fin du processus d'atomisation primaire. En effet, cette dernière influence le nombre de ligaments produits et les futures gouttes générées.

Plusieurs travaux ont modélisé puis estimé cette longueur d'onde, Hong et al. [82] Marmottant and Villermaux [115] et Rayana [144], toutefois, ceux de Fernández [58] ont été privilégiés. En effet, la proximité entre leur dispositif expérimental et la géométrie choisie pour les simulations périodiques accentue la pertinence de leurs résultats.

Les relevés de longueurs d'ondes transverses effectués par Fernández [58] sont renseignés Figure 8.1. Ces derniers ont réalisé des mesures de longueur d'onde à différentes vitesses et différentes pressions. De cette manière, des interpolations polynomiales de λ_{tr} ont pu être déterminées en fonction de la pression. Cependant, la vitesse initiale voulue du cas de référence, $U_g = 50$ m/s, n'ayant pas été utilisée par Fernández [58], une interpolation polynomiale supplémentaire pour chaque point de fonctionnement a été réalisée afin de l'estimer.

Ainsi, l'obtention des longueurs d'ondes axiales et transverses se base principalement sur les travaux de Fernández [58]. C'est un choix cohérent au vue de la grande similitude entre leur dispositif expérimental et la configuration géométrique utilisée dans cette étude.

$$\lambda_{tr} = 1.5 \text{ mm} \quad (8.6)$$

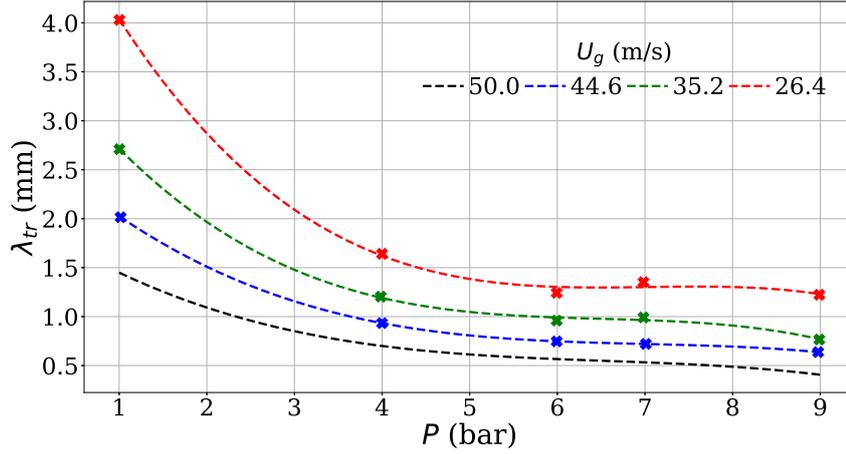


FIGURE 8.1. – Estimation de la longueur d’onde transverse, les croix sont les relevés de Fernández [58] et les droites pointillées des interpolations.

8.2. Nombres sans dimension et conditions initiales

Pour retrouver numériquement une fragmentation liquide de type ligamentaire, un maximum de nombres sans dimension a été maintenu à partir de la Table 6.2, pour le point de fonctionnement $U_g = 50$ m/s.

Pour cela, la méthodologie de similitude décrite section 6.4 fut employée, permettant de conserver les nombres sans dimension listés Table 8.3 et d’obtenir les grandeurs dimensionnelles initiales, Table 8.4.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
$1.2 \cdot 10^{-2}$	598.8	1580	11.52	$1.796 \cdot 10^{-2}$	0.75

TABLE 8.3. – Nombres sans dimension utilisés pour le cas de référence.

U_l	ρ_l	μ_l	σ	U_g	ρ_g	μ_g
2	10^3	$1.002 \cdot 10^{-3}$	$5.9 \cdot 10^{-2}$	15.81	12	$1.8 \cdot 10^{-5}$
m/s	kg/m ³	Pa·s	N/m	m/s	kg/m ³	Pa·s

TABLE 8.4. – Conditions initiales utilisés pour le cas de référence.

8.3. Géométrie et maillage

L’emploi de conditions limites périodiques impose certaines dimensions du domaine géométrique. En effet, ce type de conditions limite amplifie les longueurs d’ondes qui sont égales ou sous-multiples des dimensions du domaine géométrique. Ainsi, la longueur d’onde axiale, reflétant le mode le plus amplifié de cette direction, doit être proportionnelle à la longueur longitudinale du domaine. Le même raisonnement s’applique à la direction transverse.

Cette dépendance contraint l’établissement de la perturbation de vitesse initiale, qui a pour but d’accélérer le processus d’atomisation en se basant sur une longueur d’onde longitudinale et

transverse, équation (7.3). Ainsi, les composantes axiales et transverses de cette vitesse perturbatrice imposent une proportionnalité entre ces deux longueurs d'ondes et les longueurs du domaine qui y sont associées.

Le domaine géométrique utilisé dans cette étude est décrit ci-dessous, Table 8.5.

λ_x	λ_z	L_x	L_y	L_z
6	1.5	6	18	6
mm	mm	mm	mm	mm

TABLE 8.5. – Domaine géométrique pour le cas de référence.

De cette manière, une longueur d'onde longitudinale est prise en compte avec quatre transverses.

Le maillage utilisé dans cette étude, est un bon compromis entre rapidité pour l'obtention de résultats et précision, Table 8.6. De plus, chaque processus MPI utilisé s'exécute sur un coeur physique de calcul pour des raisons de performances.

np_x	np_y	np_z	np_{tot}	$nproc_x$	$nproc_y$	$nproc_z$	$nproc_{tot}$	α/Δ	Δ (μm)
128	384	128	$6.29 \cdot 10^6$	2	6	2	24	6.4	46.8

TABLE 8.6. – Maillage utilisé pour le cas de référence.

8.4. Temps caractéristique

Une normalisation temporelle est proposée ci-dessous afin d'établir un socle commun de comparaison pour les évolutions des caractéristiques de l'atomisation. Cette adimensionnalisation se base sur un temps convectif, λ_x/U_g , ainsi qu'un rapport des densités liquides gaz, $(\rho_g/\rho_l)^C$, équation (8.7). Par ailleurs, cette expression peut se ré-écrire sous une forme n'utilisant que des constantes, dans cette étude, et les nombres sans dimension initiaux, équation (8.8).

$$t^* = t \frac{U_g}{\lambda_x} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^C \quad (8.7)$$

$$t^* = t \frac{U_l}{\lambda_x} \sqrt{\frac{MFR}{\hat{\rho}}} \rho^C \quad \text{avec } C = -0.4 \quad (8.8)$$

La notation $(\cdot)^*$ désigne l'opération d'adimensionnalisation d'une grandeur.

8.5. Observations du processus d'atomisation

L'analyse qualitative du processus d'atomisation s'appuie sur l'évolution de la surface liquide totale (S) en parallèle à des images de l'interface. En effet, en simulation périodique le volume liquide est conservé, c'est pourquoi, la lecture des images permet de mieux comprendre les mécanismes pilotant l'évolution de la surface liquide.

Les variations de surface liquide sont normalisées par la valeur d'initialisation (S_{init}) et démontrent un processus d'atomisation décomposable en deux parties. La première illustre une déstabilisation générale du liquide puisque la quantité de surface dans le domaine ne cesse d'augmenter. La seconde, à l'opposé, est réductrice de surface et caractérise une phase de stabilisation du liquide, Figure 8.2.

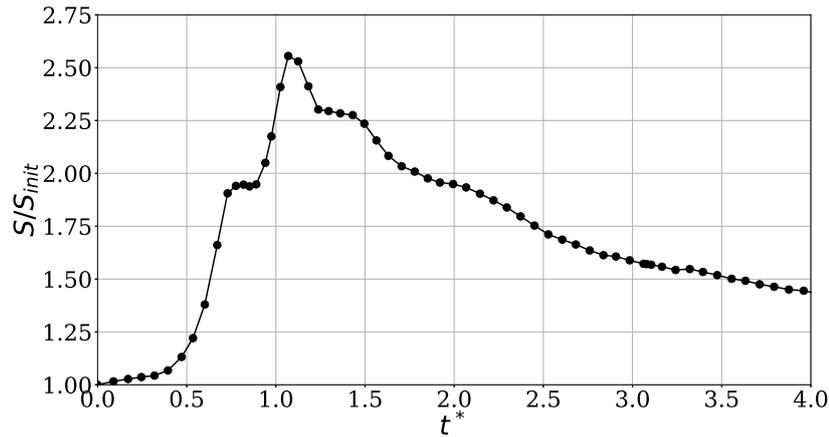


FIGURE 8.2. – Évolution de la surface liquide, cas de référence.

La première des deux phases, génératrice de surface, se déroule jusqu’au maximum de surface, proche de $t^* = 1.1$, durant lequel plusieurs phénomènes se produisent, Figure 8.3. Tout d’abord, la déstabilisation longitudinale et transverse de la nappe est visible Figure 8.3a. À chaque longueur d’onde transverse correspond une membrane qui va s’affiner jusqu’à se rompre, Figure 8.3b. Cet état d’avancement dans le processus d’atomisation est reconnaissable sur la courbe Figure 8.2 avec un plateau de surface dû à la perte de production de surface. En effet, un équilibre temporaire entre la destruction de surface, via la rupture des membranes, et la génération de surface, via l’étirement des ligaments se produit. Toutefois, un nouveau gain de surface apparaît jusqu’à $t^* = 1.1$ avec un étirement de plus en plus intense des structures ligamentaires.

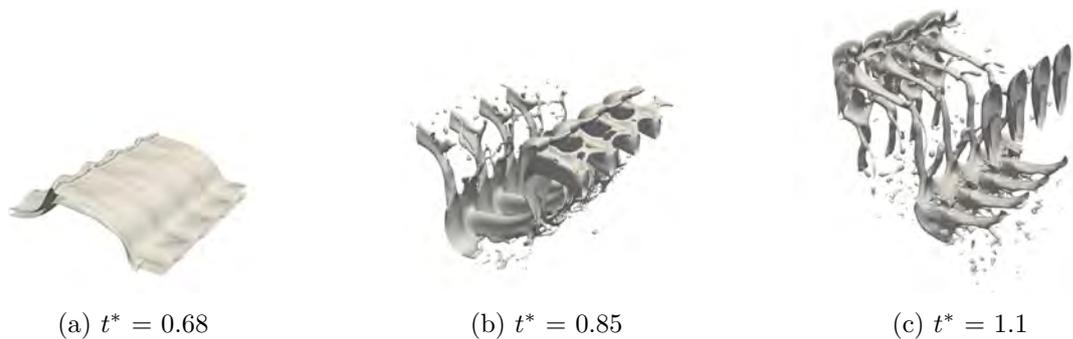


FIGURE 8.3. – Interface lors de la phase génératrice de surface, cas de référence.

La seconde phase débute juste après que le maximum de surface produite soit atteint et voit la génération et la stabilisation du spray. En effet, les structures allongées reliant le corps liquide principal, continuent de s’étirer en s’affinant avec, en parallèle la création de quelques amas, Figures 8.3c et 8.4a.

Ce comportement est reconnaissable sur l’évolution de la surface puisqu’à partir de cet instant, la surface totale du liquide diminue, c’est-à-dire que le liquide commence à se stabiliser. Ce dernier débute sa transition d’une topologie très perturbée, très oscillante, vers une forme géométrique sphérique stabilisée.

Cela se traduit topologiquement par la multiplication de gouttes, Figure 8.4b. Sous l’effet de la tension de surface, les précédentes structures allongées, affinées, sont rompues en créant des gouttes et des ligaments secondaires. Ces derniers continuent leurs transformations sphériques avec des extrémités arrondies, en raison de l’instabilité de Rayleigh-Plateau, Figure 8.4b. Finalement, sous l’effet stabilisateur de la tension de surface, un nuage polydisperse de gouttelettes est généré avec quelques grandes structures non sphériques restantes aux extrémités verticales du domaine, Figure 8.4c. Celles-ci seront transformées en gouttelettes ultérieurement.

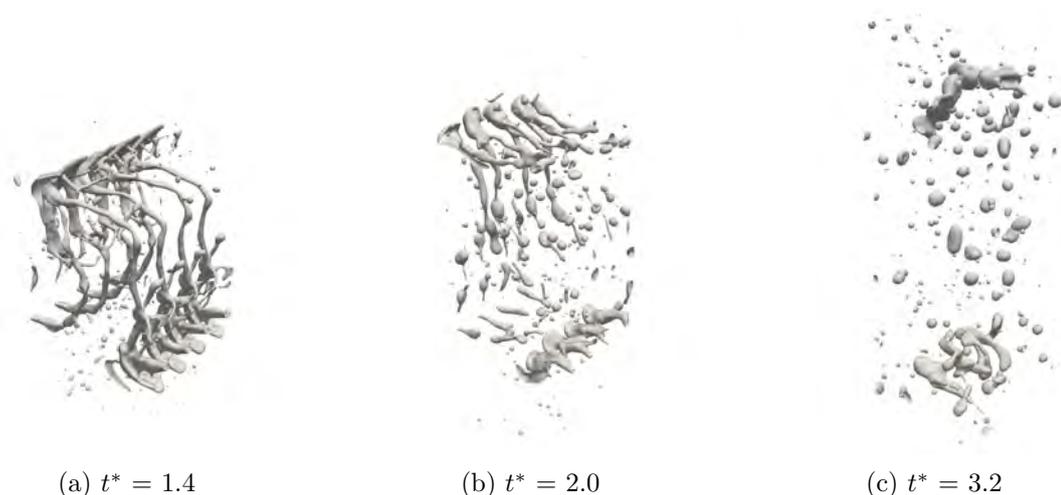


FIGURE 8.4. – Interface lors de la phase réductrice de surface, cas de référence.

8.6. Caractéristiques de l'atomisation

L'analyse qualitative précédente du processus d'atomisation a mis en évidence une fragmentation liquide de type ligamentaire, a priori, cohérente avec les conditions initiales et les nombres sans dimension initiaux, Tables 8.3 et 8.4.

Pour statuer quantitativement sur ce processus d'atomisation, l'algorithme de détection des structures liquides, décrit dans le chapitre 5, fut employé. Ce dernier génère des bases de données qui recueillent des informations locales et intégrales à propos des structures générées durant le processus d'atomisation. Grâce à ces dernières et à l'aide de scripts Python, une catégorisation de ces structures, nommées aussi amas, est possible en Goutte, Ligament et Autre, section 5.4. Toutefois, cette étude se restreint à l'investigation des gouttes puisque les conditions limites périodiques multiplient les possibilités de coalescences des structures allongées (Ligament) et biaisent ainsi leurs analyses. La description complète des critères topologiques permettant de catégoriser les structures liquides est réalisée section 5.4. Enfin, des indicateurs globaux sont mis en place pour statuer sur l'atomisation accomplie tandis que d'autres indicateurs, locaux, sont utilisés afin de compléter la compréhension de ce processus.

Des informations complémentaires à cette étude sont disponibles dans l'annexe A.1.

8.6.1. Indicateurs globaux

La liste des indicateurs globaux utilisés, afin de caractériser quantitativement ce processus d'atomisation, est présentée ci-dessous :

- Volume total des gouttes, V_{gt} .
- Nombre de gouttes, n_{gt} .
- Surface totale des gouttes, S_{gt} .

L'indice ($_{gt}$) désigne les amas de type gouttes. D'autre part, la surface liquide initiale, $S_{l\ init}$, ainsi que le volume liquide initial, $V_{l\ init}$, sont par la suite employés pour des normalisations. Dans cette configuration d'étude, la surface liquide évolue durant le processus de fragmentation liquide alors que le volume est conservé.

Le premier de ces indicateurs globaux indique l'évolution du pourcentage de volume de goutte adimensionné par le volume liquide initial, $V_{gt}/V_{l\ init}$. Cette quantité permet de juger du niveau d'avancement de l'atomisation générale du liquide, Figure 8.5. Ce pourcentage peut être assimilé à un taux d'atomisation car cette grandeur représente une conversion de liquide en goutte. Le taux d'atomisation est globalement croissant durant toute la simulation, ce qui démontre une conversion continue du liquide en goutte. Son évolution est presque linéaire, excepté l'oscilla-

tion autour de $t^* = 3$, ce qui est favorable à une potentielle modélisation. Enfin, ce processus d'atomisation est très efficace puisque le maximum atteint, se situant en fin de simulation, est de 80 %.

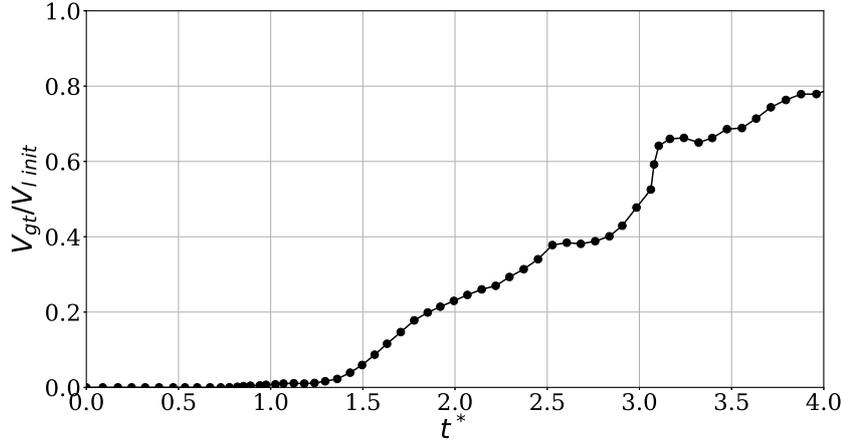


FIGURE 8.5. – Volume total des gouttes, cas de référence.

Ensuite le nombre de gouttes, n_{gt} est présenté, Figure 8.6. Ce dernier croît durant une large partie de la simulation, jusqu'à $t^* \approx 2.5$ puis commence à décliner au-delà. Durant cette évolution, deux instants de productions majeurs sont identifiables. Le premier se produit lors de la rupture de membrane, pour $t^* \approx 0.8$ Figure 8.2, où des gouttes sont générées dont le volume cumulé est négligeable, Figure 8.5. Le second se déroule sur un intervalle plus long, $1.0 < t^* \leq 2.5$, lors de la rupture des filaments, ligaments, reliant les deux parties de la nappe initiale. Cette partie de l'atomisation génère plus de gouttes et ces dernières possèdent une quantité importante du liquide total, de l'ordre de 40 %.

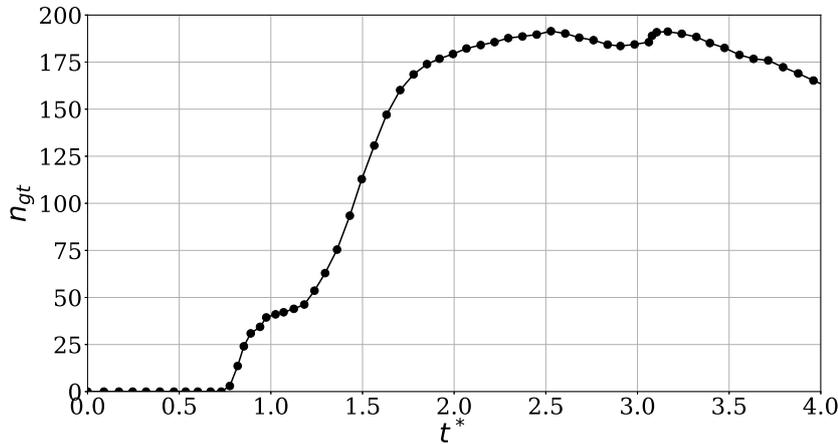


FIGURE 8.6. – Nombre total de gouttes, cas de référence.

Enfin, l'évolution de la surface totale des gouttes adimensionnée par la surface liquide initiale de la nappe, S_{gt}/S_{l_init} , complète cette analyse, Figure 8.7. Cet indicateur, intrinsèquement lié aux fluctuations du volume et du nombre de gouttes, possède les mêmes variations, que les indicateurs précédemment cités, aux mêmes instants. En effet, les phases de production de gouttes et de volume identifiées précédemment y sont visibles. Le maximum atteint dépasse la valeur de surface de la nappe initiale ($\approx 110\%$). De plus, une stagnation dans la production de surface se retrouve en fin de simulation pour $t^* \geq 3$. Ce comportement, associé aux variations croissantes du volume de gouttes et à la décroissante du nombre de gouttes, illustre une coalescence généralisée des gouttes en fin de simulation.

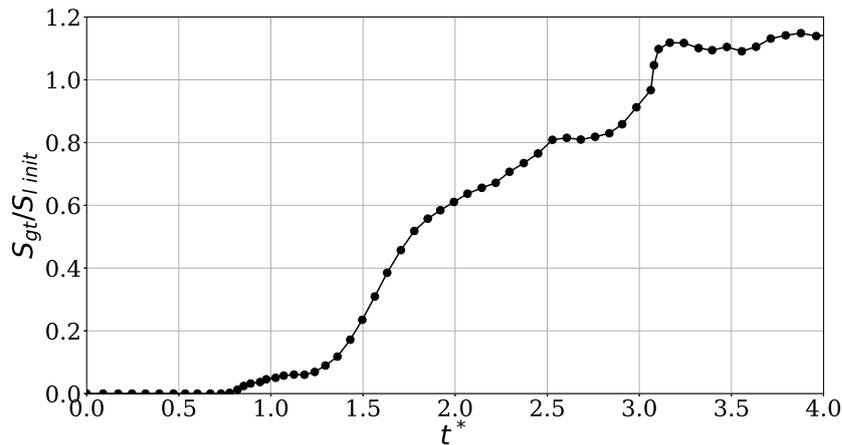


FIGURE 8.7. – Surface totale des gouttes, cas de référence.

8.6.2. Indicateurs locaux

Afin d'analyser plus précisément les caractéristiques du spray durant sa formation, de nouveaux indicateurs désignés comme locaux, ont été utilisés. Pour cela, le volume de goutte a été analysé, V_{gt} , en fonction de deux types de distribution, d/Δ et $y/2\alpha$, et du temps t^* .

Types de distribution	Grandeurs analysées
Taille, d/Δ .	Volume des gouttes, V_{gt} .
Hauteur, $y/2\alpha$.	

La classification en fonction du diamètre est normalisée par la taille de la maille du calcul, Δ issue de la Table 8.6. Le rapport d/Δ représente différentes classes de diamètres qui caractérisent par taille les gouttes détectées durant la simulation. Le rapport $y/2\alpha$ désigne des intervalles verticaux qui illustrent la distribution verticale des gouttes. Cette hauteur est normalisée par rapport à la demi épaisseur initiale de la nappe $\alpha/2$. De plus, les bornes minimales et maximales de cette échelle correspondent aux limites verticales du domaine géométrique, $y/2\alpha = \pm L_y/2$ (± 60).

Dès les premiers instants, le volume des gouttes générées se concentre autour de deux classes de diamètre, $d/\Delta = (8,14)$, et ce jusqu'à la fin de rupture des ligaments, $t^* \approx 2.5$. Au-delà de cet instant, les proportions de volumes de gouttes détectés augmentent, notamment autour de la classe $d/\Delta = 14$, tandis que de nouvelles larges gouttes apparaissent dans des classes supérieures, $d/\Delta > 22$, Figure 8.8.

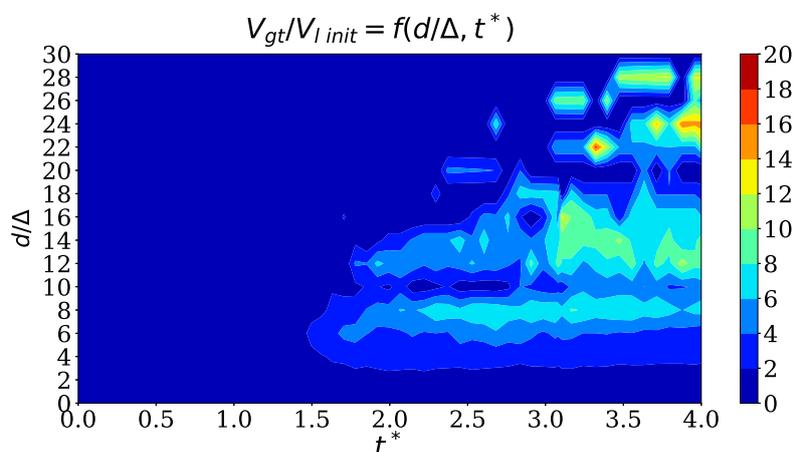


FIGURE 8.8. – Distribution du volume de gouttes par taille, cas de référence.

La dispersion verticale des gouttes, constatée visuellement sur les allures de l'interface Figure 8.4, se confirme Figure 8.9. Jusqu'à $t^* \approx 2.5$, la distribution du volume des gouttes est plutôt uniforme, tandis qu'au-delà, de fortes concentrations apparaissent en bordure du domaine vertical. Ces forts taux de volume de gouttes proviennent de la sphérisation, sous l'effet de la tension de surface, des larges structures situées aux extrémités verticales, Figure 8.4c. De plus, ce phénomène se retrouve, symétriquement, en bordures du domaine, $y/2\alpha = \pm 36$. La présence et le maintien des larges structures à ces hauteurs s'explique par l'action combinée des conditions limites périodiques à la génération et leurs déplacements verticaux. En effet, aucune vitesse verticale n'est initialisée dans le domaine, en dehors de la perturbation initiale. De ce fait, lorsque ces structures liquides se retrouvent en bord de domaines, avec leurs faibles vitesses verticales, les conditions limites périodiques, par propagation du champ aérodynamique, atténuent leurs déplacements jusqu'à les maintenir dans cette position.

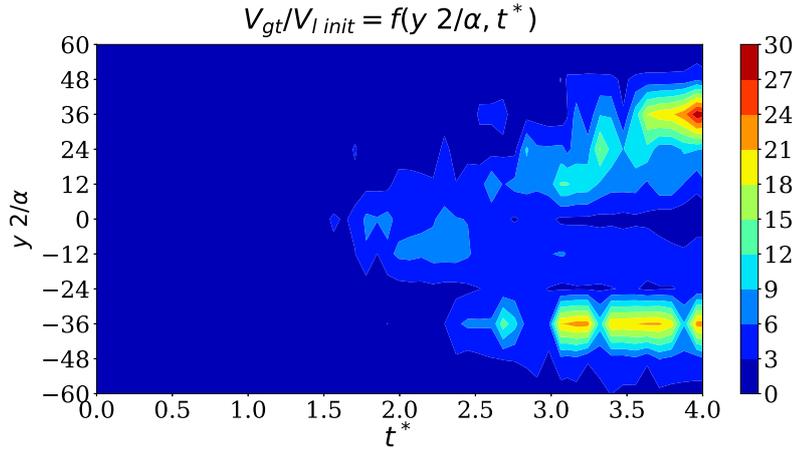


FIGURE 8.9. – Distribution du volume de gouttes par hauteur, cas de référence.

8.7. Diamètre caractéristique

Dans des applications d'échanges d'énergies telle que l'atomisation, le diamètre de Sauter est employé pour analyser les propriétés d'un spray.

$$d_{32}(t) = 6 \frac{\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} V_{gt}(i, t)}{\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} S_{gt}(i, t)} \quad (8.9)$$

Avec $n_{gt}(t)$ le nombre de gouttes à l'instant t et $V_{gt}(i, t)$, $S_{gt}(i, t)$, le volume, la surface, de la goutte i à l'instant t .

Un tel diamètre démontre spécifiquement dans quelles classes la surface est principalement produite, ce qui est essentiel pour les études de densités d'interfaces. En effet, ce dernier estime un diamètre équivalent d'un spray monodisperse possédant le même rapport de volume et surface cumulé. Dans cette étude, son évolution ne cesse de croître, dû à la favorisation des coalescences des gouttes par les conditions limites périodiques. De par sa définition, ce diamètre accorde plus d'importance aux larges gouttes qu'aux petites, ce qui explique les sursauts de pentes coïncidant avec la détection de nouvelles grosses gouttes, Figure 8.10.

Une analogie aux expériences peut être faite puisque, en pratique, cette mesure est effectuée à une certaine distance de l'injecteur, lorsque les caractéristiques du spray n'évoluent plus. Or, dans cette vision périodique, l'atomisation d'un liquide à l'instant t est équivalente, dans un contexte expérimental, à une fragmentation en aval de l'injecteur. Cette distance nécessaire pour mesurer l'atomisation d'un liquide se transpose donc à une durée dans cette vision périodique.

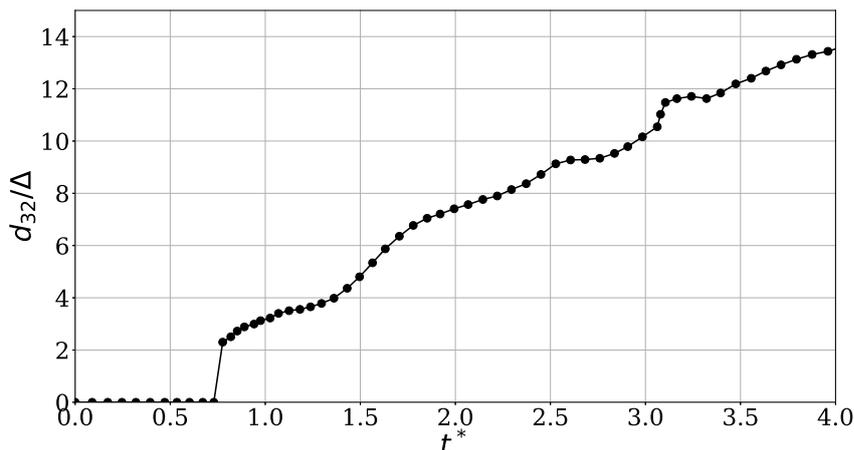


FIGURE 8.10. – Diamètre de Sauter du spray, cas de référence.

Une première proposition de temps de comparaison est l'instant final de la simulation pour lequel le taux d'atomisation (de conversion du liquide en goutte) est le plus élevé. Ce temps, désigné comme temps final (t^*_{fin}) dans la Table 8.7, soulève toutefois plusieurs inconvénients. En effet, des phénomènes préjudiciables à la représentativité de la simulation se produisent dès $t^* > 3.0$. Une coalescence généralisée des gouttes, illustrée par les indicateurs globaux, se produit au-delà de cet instant, Figures 8.5, 8.6 et 8.7. En effet, le nombre ainsi que la surface des gouttes diminuent tandis que le volume de goutte augmente. Par ailleurs, de larges gouttes sont détectées proches des extrémités verticales du domaine lorsque $t^* > 2.5$, Figure 8.9. Ces gouttes sont générées par l'influence des conditions limites périodiques ainsi que la tension de surface. Tout ceci illustre les effets néfastes causés par les conditions limites périodiques, à savoir, la favorisation des coalescences liquides.

Toutes ces raisons font qu'un second temps de comparaison est employé, afin d'avoir un relevé de diamètre de Sauter le plus pertinent possible.

Ce temps de comparaison, t^*_{cmp} , est un compromis entre l'avancement de la simulation et la représentativité de cette dernière. En effet, un relevé trop tôt n'est pas intéressant puisque le processus d'atomisation débute alors qu'un relevé trop tard est potentiellement biaisé par les coalescences dues aux conditions limites. Ce temps de comparaison fut fixé à $t^*_{cmp} = 2.5$, afin de précéder la subite augmentation de surface et de volume de gouttes ainsi que la détection de gouttes induites par les conditions limites.

Les relevés de ce diamètre caractéristique sont résumés dans la Table 8.7.

	t^*_{cmp}	t^*_{fin}		
$d_{32}(\mu\text{m})$	421.2	655.2	$t^*_{cmp} = 2.5$	(8.10)
d_{32}/Δ	9.0	14.0	$t^*_{fin} = 4.0$	(8.11)

TABLE 8.7. – Relevés des diamètres de Sauter, cas de référence.

8.8. Conclusion de l'étude du cas de référence

Cette étude d'atomisation de nappe cisailée en configuration périodique, a démontré la possibilité de reproduire une fragmentation de type ligamentaire en ne conservant que les nombres sans dimension les plus pertinents.

Pour cela, un domaine géométrique a été dimensionné en fonction des longueurs d'ondes les plus instables. Ces dernières ont été obtenues à partir de résultats d'expériences, les plus pertinents par rapport à la configuration numérique employée.

Ensuite, une similitude par rapport aux expériences de Dejean [45] a été réalisée en conservant les nombres sans dimension jugés les plus pertinents. À partir de ces derniers, les conditions initiales du cas de référence furent établies permettant de réaliser la simulation.

Suite à cela, l'observation qualitative du processus de fragmentation avec l'identification des différentes phases de l'atomisation a été réalisée. En complément, une analyse quantitative a été établie, permettant de juger de la qualité du processus d'atomisation reproduit ainsi que de ses limitations.

Les conditions limites périodiques favorisent les coalescences des structures liquides et ainsi dégradent la représentativité de la simulation par rapport à l'expérience. Ce phénomène désigné comme coalescence forcée est d'autant plus significatif en fin de simulation. Cependant, l'utilisation de l'algorithme de détection a permis d'identifier le moment où cette limitation commence à influencer la simulation, permettant d'exploiter les résultats avant ce moment.

Influence des paramètres géométriques

Ce chapitre s'intéresse à l'influence des paramètres géométriques tels que la hauteur du domaine ou la taille de maille de la simulation sur le processus d'atomisation ainsi que sur la représentativité des simulations.

Pour cela une méthodologie d'analyse identique à celle du cas de référence fut mise en place dans ces deux études. Cette dernière permet d'illustrer qualitativement les variations induites par ces paramètres géométriques sur le processus d'atomisation mais aussi de quantifier leurs influences sur diverses quantités telle que la production de gouttes.

Sommaire

9.1. Introduction	138
9.2. Effet de la résolution, Δ	138
9.2.1. Géométrie et maillage	138
9.2.2. Observations des processus d'atomisation	138
9.2.3. Caractéristiques de l'atomisation	141
9.2.3.1. Indicateurs globaux	141
9.2.3.2. Indicateurs locaux	141
9.2.4. Diamètre caractéristique	142
9.2.5. Conclusion	143
9.3. Influence du cloisonnement vertical, L_y	144
9.3.1. Géométries et maillages	144
9.3.2. Observations des processus d'atomisations	144
9.3.3. Caractéristiques de l'atomisation	145
9.3.3.1. Indicateurs globaux	145
9.3.3.2. Indicateurs locaux	147
9.3.4. Diamètre caractéristique	147
9.3.5. Conclusion	148
9.4. Conclusion sur l'influence des paramètres géométriques	149

9.1. Introduction

L'objectif de l'étude est d'analyser l'influence séparée des paramètres géométriques (résolution Δ et hauteur L_y) sur les simulations d'atomisation en configuration périodique. Plus particulièrement l'impact de ces paramètres sur la représentativité des simulations par rapport à l'expérience.

Le régime d'atomisation choisi pour ces études reste identique à celui de l'étude précédente, section 8.2. Seules les informations les plus pertinentes de ces études sont présentées dans ce chapitre. Toutes celles complémentaires sont résumées en annexe A.2 et A.3.

9.2. Effet de la résolution, Δ

9.2.1. Géométrie et maillage

Pour réaliser cette étude, la configuration géométrique précédente a été ré-employée, Table 8.5, à savoir un domaine possédant une longueur d'onde longitudinale et quatre transverses. Les maillages successifs sont établis en raffinant plusieurs fois chaque direction du domaine, \vec{x} , \vec{y} et \vec{z} et sont résumés ci-dessous dans la Table 9.1.

np_x	np_y	np_z	np_{tot}	$nproc_x$	$nproc_y$	$nproc_z$	$nproc_{tot}$	α/Δ	Δ (μm)
128	384	128	$6.29 \cdot 10^6$	2	6	2	24	6.4	46.8
256	768	256	$50.33 \cdot 10^6$	4	12	4	192	12.8	23.4
512	1536	512	$402.65 \cdot 10^6$	8	24	8	1536	25.6	11.7

TABLE 9.1. – Maillages utilisés, effet de la résolution.

9.2.2. Observations des processus d'atomisation

Des différences comportementales se distinguent entre les deux premières simulations, $\alpha/\Delta = (6.4, 12.8)$, et la dernière, $\alpha/\Delta = 25.6$, Figure 9.1. En effet, les deux premières possèdent des évolutions semblables avec des instants associées aux ruptures de membranes ainsi qu'aux maximums de surfaces qui coïncident. Le changement de résolution n'affecte pas leurs taux de production de surfaces (pente des courbes) lors des premiers instants du processus d'atomisation, $t^* \leq 0.75$. D'ailleurs, cette phase d'atomisation est associée au développement des grandes échelles de l'interface puisqu'aucune nouvelle structure liquide n'est encore générée. Ainsi, la superposition des courbes de surface durant cet intervalle démontre que la résolution, pour ces deux simulations, n'affecte pas le développement des grandes échelles. Enfin, l'écart de surface visible entre ces deux simulations est cohérent avec l'augmentation de résolution. En effet, une taille de maille plus petite, Δ , permet de résoudre numériquement un plus grand nombre de structures ainsi que d'augmenter la valeur de la surface liquide totale.

À l'opposé, l'évolution de surface de la plus grande des résolutions, $\alpha/\Delta = 25.6$, se différencie sur plusieurs points. Tout d'abord, l'instant correspondant à la rupture de membrane, associée à une rupture de pente de l'évolution de surface, n'est pas visible. Ensuite, le maximum global de surface est atteint plus tôt que dans les deux autres simulations et avec une intensité moindre. Enfin, l'accroissement de surface jusqu'à $t^* = 0.75$, qui représente la contribution des grandes échelles de l'interface, est amplifiée avec un taux de production plus intense. Cela démontre une première modification du comportement de l'interface dès cette première phase du processus d'atomisation.

Une analyse visuelle complémentaire de l'interface a été réalisée pour les deux résolutions extrêmes, $\alpha/\Delta = (6.4, 25.6)$, et à plusieurs instants du processus d'atomisation.

Dès les premiers instants, les longueurs d'ondes perturbatrices initiales, longitudinales et transverses, sont reconnaissables sur les profils de l'interface, Figures 9.2a et 9.2b. Néanmoins, des

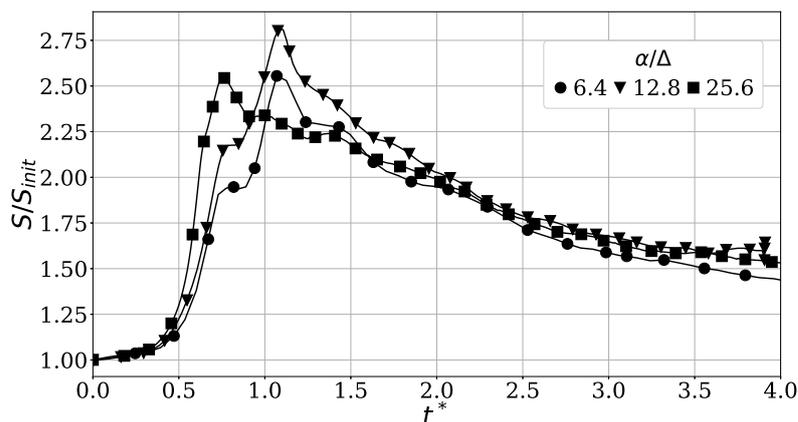


FIGURE 9.1. – Évolution de la surface liquide, effet de la résolution.

modifications dans la forme de l'oscillation sont observées. L'augmentation de résolution atténue l'amplitude de l'oscillation longitudinale tandis que de nouvelles longueurs d'ondes excitées apparaissent à l'interface, Figure 9.2b. Ceci est dû à la multiplication du nombre de points utilisés pour résoudre l'interface qui permet à un plus grand nombre de sous-longueurs d'ondes de se développer. Ces dernières affectent la topologie de l'interface dès cette première phase du processus d'atomisation et peuvent potentiellement modifier le reste du processus de fragmentation.

FIGURE 9.2. – Interface à $t^* = 0.6$, effet de la résolution.

Ces différences comportementales se poursuivent lors de la scission de la nappe initiale et la formation d'épais filaments liquides, Figure 9.3. Les écarts d'amplitude décrit précédemment, Figure 9.2, se distinguent au-travers du positionnement vertical des structures liquides. L'étalement liquide vertical est bien plus élevé dans le cas de la simulation grossière Figure 9.3a, que pour le cas plus raffiné, Figure 9.3b. Cette restriction verticale impacte les épaisseurs des filaments liquides qui étant moins étirés, allongés, restent épais et deviennent plus difficiles à fragmenter dans le cas résolu.

À ce stade de l'atomisation, le nombre de structures liquides isolées diffère entre les deux simulations. Ce nombre, peu élevé pour la simulation grossière Figure 9.3a, est décuplé dans le cas de la plus résolue Figure 9.3b. Cette différence provient des ruptures liquides des nappes. D'un côté, la rupture de type membrane a tendance, sous l'effet de la tension de surface, à concentrer le liquide restant autour des structures proches, sous forme de bourrelets, Figure 9.3a. De l'autre côté, une rupture à cause d'un rayon de courbure faible, expulse et génère une multitude de petites gouttes, Figure 9.3b.

Le dernier relevé visuel concerne la stabilisation du spray généré, Figures 9.4a et 9.4b.

Bien qu'ayant des rapports de surfaces identiques, Figure 9.1, le niveau d'atomisation semble plus avancé pour la plus petite des résolutions, $\alpha/\Delta = 6.4$. Peu de structures allongées, filaments ou ligaments liquides, sont visibles et une majorité des structures liquides semblent proche d'un état topologique sphérique, Figure 9.4a.

A contrario, les filaments liquides sont toujours présents, rattachés à d'imposantes structures



FIGURE 9.3. – Interface à $t^* = 1.0$, effet de la résolution.

et semblent concentrer la majeure partie du volume liquide, pour la plus grande résolution $\alpha/\Delta = 25.6$, Figure 9.4b.

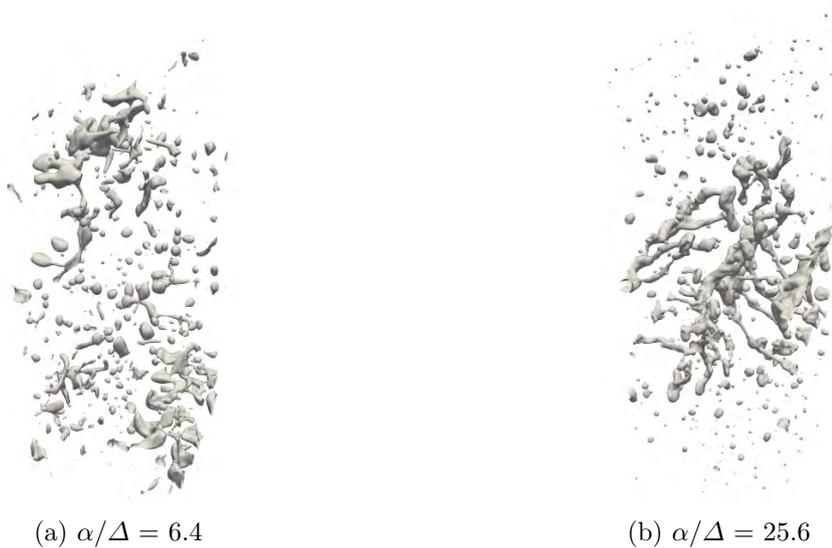


FIGURE 9.4. – Interface à $t^* = 2.2$, effet de la résolution.

Ce retard d'avancement du processus d'atomisation semble provenir du développement des sous-longueurs d'ondes dans le cas raffiné. Ces dernières modifient le processus d'atomisation et entraîne une atténuation du déplacement vertical de la nappe liquide. En effet, en se déroulant dans un volume plus restreint, verticalement, les structures liquides sont moins étirées, moins allongées, plus épaisses, et ainsi ont besoin de plus de temps pour se rompre et générer des gouttes.

Par ailleurs, l'augmentation de résolution accroît le temps nécessaire à la rupture des structures liquides puisque cette dernière est pilotée par la tension de surface et la taille de maille.

Enfin, les conditions limites périodiques, alliées à l'augmentation de résolution, augmentent ce temps caractéristique du processus d'atomisation. En effet, une meilleure résolution induit un temps d'existence (jusqu'à rupture) des structures plus long. Or, ce temps rallongé permet un plus grand étirement de ces dernières, une élongation plus importante. Ceci peut devenir problématique en configuration périodique car le domaine géométrique est restreint à la longueur d'onde souhaitée. Si l'élongation d'une structures liquide est supérieure aux dimensions du domaine, les conditions limites empêcheront sa rupture en le faisant re-coalescer, avec lui-même. Cet effet, préjudiciable à l'atomisation et à la représentativité des simulations, est décuplé en présence d'un grand nombre de structures liquides puisque les potentielles re-coalescences sont démultipliées.

9.2.3. Caractéristiques de l'atomisation

9.2.3.1. Indicateurs globaux

Les évolutions des taux d'atomisation (pentes des courbes) confirment la dissemblance comportementale entre les deux premières simulations ($\alpha/\Delta = (6.4, 12.8)$) et la dernière ($\alpha/\Delta = 25.6$), Figure 9.5. En effet, les deux premières possèdent des pentes globalement similaires avec des phases de croissances (maximums atteints) et de décroissances comparables. A contrario, la plus résolue des simulations se différencie par son taux de production de volume de goutte beaucoup plus intense.

Le premier doublement de la résolution ($\alpha/\Delta = (6.4, 12.8)$) n'entraîne qu'une variation maximale de 10 % du taux d'atomisation à $t^* = 2.7$ (limite temporelle de représentativité des simulations). Cet écart est plus que doublé lorsque la résolution est de nouveau multipliée ($\alpha/\Delta = (12.8, 25.6)$) ce qui appuie l'observation précédente de changement de processus d'atomisation pour des variations de résolution trop importante.

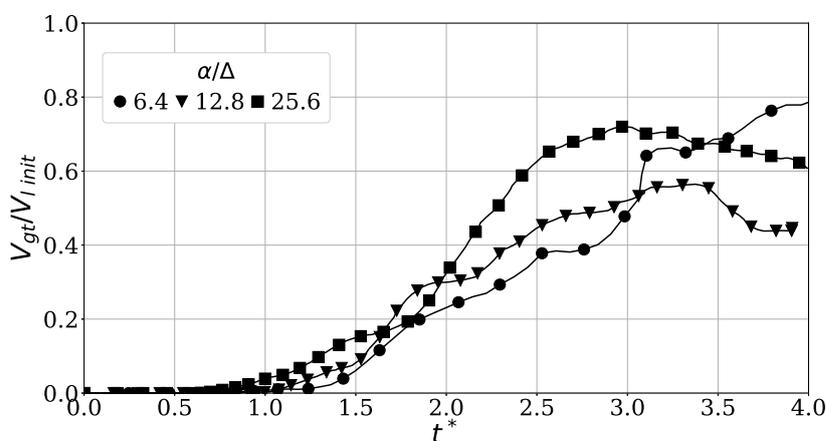


FIGURE 9.5. – Volume total des gouttes, effet de la résolution.

Les évolutions de la surface totale des gouttes permettent de récupérer des informations sur le spray généré, Figure 9.6. L'allure constante puis la chute du volume et de la surface de goutte dès $t^* \geq 2.75$ illustrent une limite temporelle dans la représentativité des simulations.

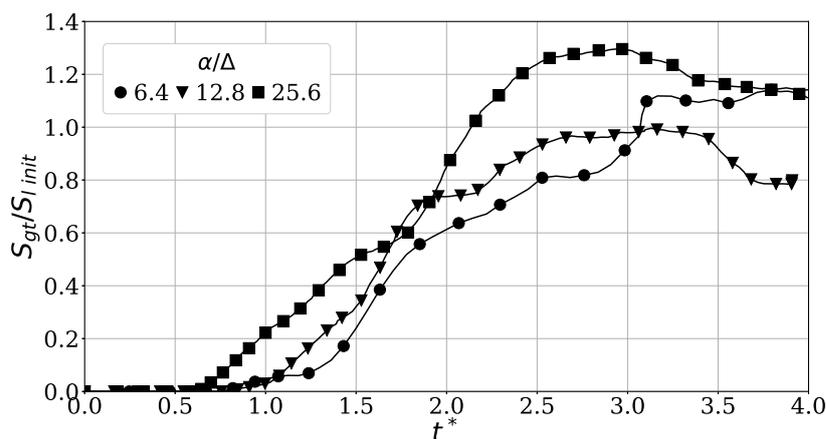


FIGURE 9.6. – Surface totale des gouttes, effet de la résolution.

9.2.3.2. Indicateurs locaux

Les distributions en fonction du diamètre sont adimensionnées par la plus petite des résolutions employées dans les calculs, $\Delta_{min} = 11.7 \mu\text{m}$, Table 9.1. Définir Δ_{min} de cette manière permet

de conserver et de comparer toutes les gouttes détectées dans une liste de classes de diamètres transposables dans chacune des simulations.

La distribution verticale du volume des gouttes illustre l'effet de la résolution sur le processus d'atomisation, Figure 9.7. L'augmentation croissante de la résolution favorise le développement de sous-longueurs d'ondes qui modifient le processus d'atomisation. Cela entraîne une limitation du déplacement vertical du liquide qui, couplé au cisaillement et à la tension de surface, mène à une génération de gouttes dans un volume de plus en plus confiné, Figures 9.7a 9.7b et 9.7c. Par exemple, dans le cas $d/\Delta = 6.4$, la plus grande portion du volume des gouttes (30 %) se situe aux abords des extrémités verticales du domaine. C'est l'exact opposé pour la plus résolue des simulations, $d/\Delta = 25.6$, qui concentre ce même volume à l'origine.

Les écarts de déplacements verticaux du volume de gouttes entre les deux premières simulations, Figures 9.7a et 9.7b, sont bien plus petits que ceux entre les deux dernières, Figures 9.7b et 9.7c. Cela signifie que le changement de résolution impacte de façon non-linéaire la répartition verticale du volume des gouttes, Figure 9.7d.

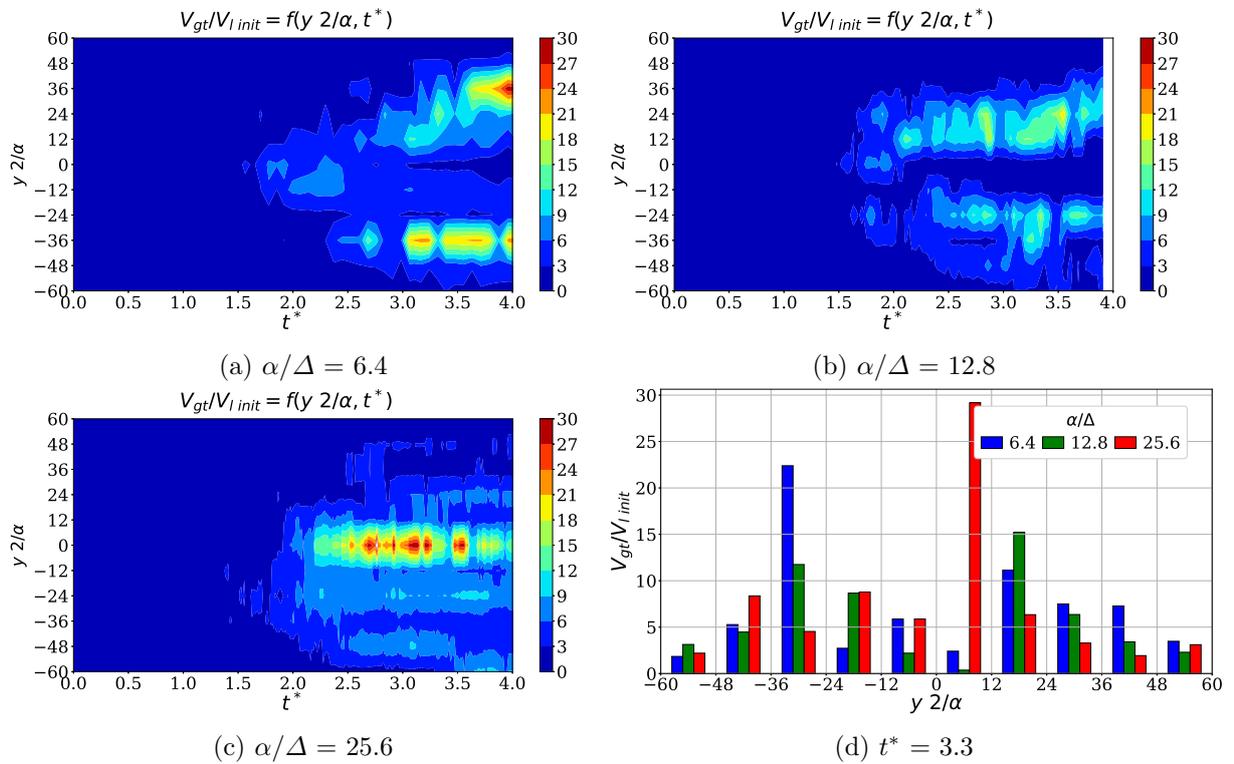


FIGURE 9.7. – Distribution du volume de gouttes par hauteur, effet de la résolution.

9.2.4. Diamètre caractéristique

La simulation la plus résolue ($\alpha/\Delta = 25.6$) reproduit un processus d'atomisation bien trop éloigné des deux autres, c'est pourquoi son analyse n'a pas été prolongée.

Le changement de résolution affecte peu les évolutions du diamètre de Sauter durant la majeure partie du processus d'atomisation, Figure 9.8. Cette absence de dépendance aux changements de résolutions s'explique par des évolutions de volume et de surface de gouttes similaires et plus généralement des processus d'atomisation analogues, Figures 9.5 et 9.6.

α/Δ	t^*_{cmp}		t^*_{fin}	
	6.4	12.8	6.4	12.8
d_{32} (μm)	433	456	632	503
d_{32}/Δ_{min}	37	39	54	43

TABLE 9.2. – Relevés des diamètres de Sauter, effet de la résolution.

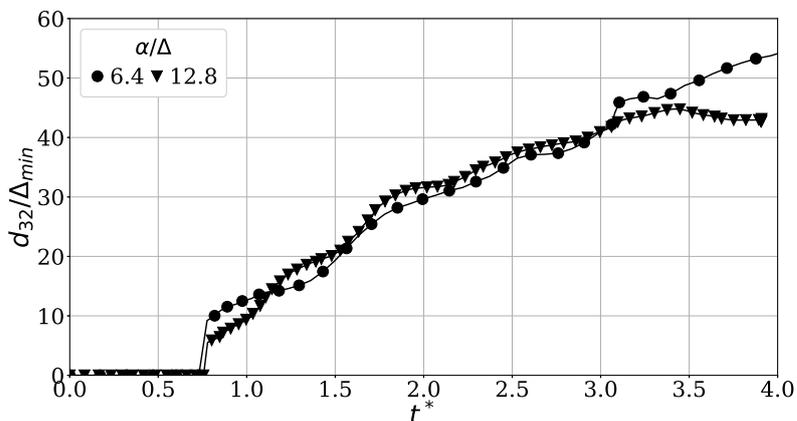


FIGURE 9.8. – Diamètre de Sauter, effet de la résolution.

9.2.5. Conclusion

L'objectif de ce point d'investigation était de démontrer l'influence de la résolution sur le processus d'atomisation, d'un point de vue qualitatif et quantitatif.

Tout d'abord, les visualisations de l'interface illustrent l'influence de résolution sur le développement des grandes échelles. L'augmentation de la résolution permet à un plus grand nombre de sous-longueurs d'ondes de se développer et ainsi modifie le processus d'atomisation. Cela impacte le développement des grandes échelles avec une amplitude des oscillations verticales diminuée ainsi qu'une dispersion verticale du liquide réduite.

En effet, l'un des inconvénients de la simulation périodique est l'estimation de la longueur d'onde la plus instable : l'hypothèse faite dans ce travail en utilisant une valeur proche de celle mesurée dans les expériences, semble ne pas être vérifiée pour des hautes fréquences captées par des maillages très raffinés.

Toutefois, la représentativité générale des simulations périodiques n'est pas remise en cause puisque l'utilisation de résolutions moins élevées conserve un processus d'atomisation de type ligamentaire. Le comportement est qualitativement analogue pour les deux résolutions, grossière et intermédiaire. L'atomisation d'une longueur d'onde donnée est très similaire dans ces deux cas, avec un écart maximal de 10 % sur le taux d'atomisation. Pour cette raison, la première résolution a été conservée pour la suite de l'étude. Cela a permis de limiter l'impact induit par les conditions limites (coalescences forcées), de conserver plus longtemps la représentativité des simulations mais aussi de multiplier les points d'investigation en raison de coûts numériques amoindris. Dans la seconde partie de ce cette thèse, cas plus réaliste des simulations spatiales, les instabilités se développeront naturellement, écartant l'incertitude d'une longueur d'onde imposée.

9.3. Influence du cloisonnement vertical, L_y

9.3.1. Géométries et maillages

Afin de réaliser cette étude deux hauteurs, L_y , ont été arbitrairement choisies en conservant toutes les autres grandeurs géométriques identiques au cas de référence, Tables 8.5 et 8.6. Les deux domaines géométriques utilisés sont décrits ci-dessous, Table 9.3.

λ_x	λ_z	L_x	L_y	L_z
6	1.5	6	8	6
6	1.5	6	20	6
mm	mm	mm	mm	mm

TABLE 9.3. – Domaines géométriques utilisés, influence de la hauteur.

9.3.2. Observations des processus d'atomisations

Le changement de hauteur influence peu le déroulement général du processus d'atomisation puisque les évolutions de surfaces sont proches, Figure 9.9. Un processus d'atomisation analogue en configuration périodique est visible, avec une phase globalement génératrice de surface, $t^* \leq 1.2$, suivie d'une réductrice, $t^* > 1.2$.

Plus précisément, le développement des grandes échelles ainsi que la phase caractéristique de rupture de membrane restent confondus. Un léger écart entre ces évolutions se distingue proche du maximum de production de surface, $t^* = 1.25$, et s'estompe dès le début de la phase de stabilisation du spray. Enfin, un nouvel excédent de surface apparaît dans cette phase de stabilisation, proche de $t^* = 1.75$, et s'atténue plus tardivement faisant confondre les évolutions de surfaces en fin de simulation.

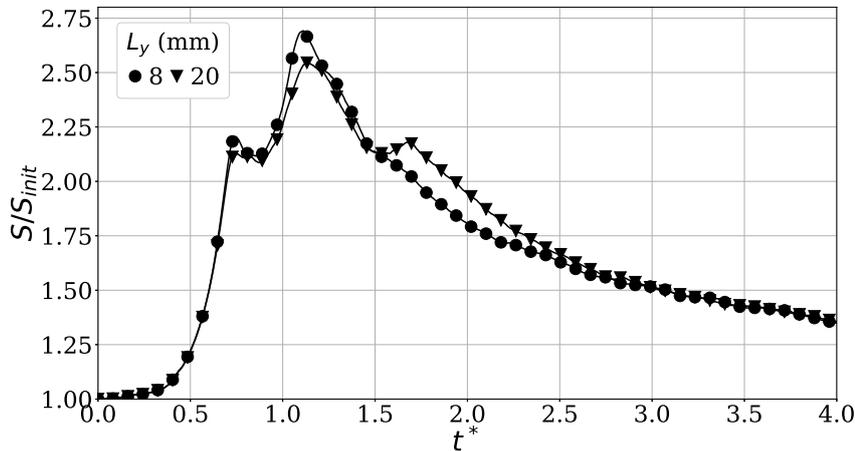


FIGURE 9.9. – Évolution de la surface liquide, influence de la hauteur.

Juste avant l'instant associé au maximum de surface, les aspects de la nappe initiale sont similaires avec des oscillations, amplitudes verticales et épaisseurs liquides proches Figure 9.10. Cependant, quelques structures détachées sont visibles pour la simulation de plus faible hauteur, Figure 9.10a, expliquant l'excédent de surface détecté précédemment, Figure 9.9.

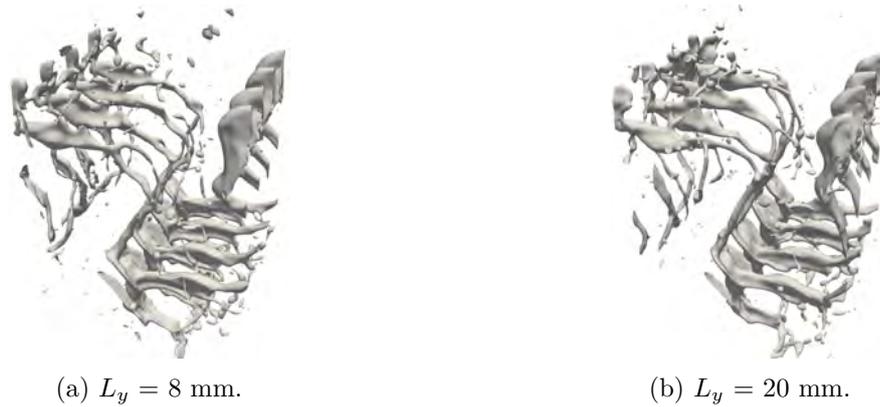


FIGURE 9.10. – Interface à $t^* = 1.0$, influence de la hauteur.

L'influence de la hauteur se constate principalement en fin d'atomisation, lors de la stabilisation du spray, comme indiqué par le relevé de surface, Figure 9.9. La restriction verticale du domaine rapproche les structures liquides entraînant la multiplication des coalescences forcées par les conditions limites, Figure 9.11. Ces dernières produisent des structures de plus en plus volumineuses, ce qui réduit la quantité de surface dans le domaine.

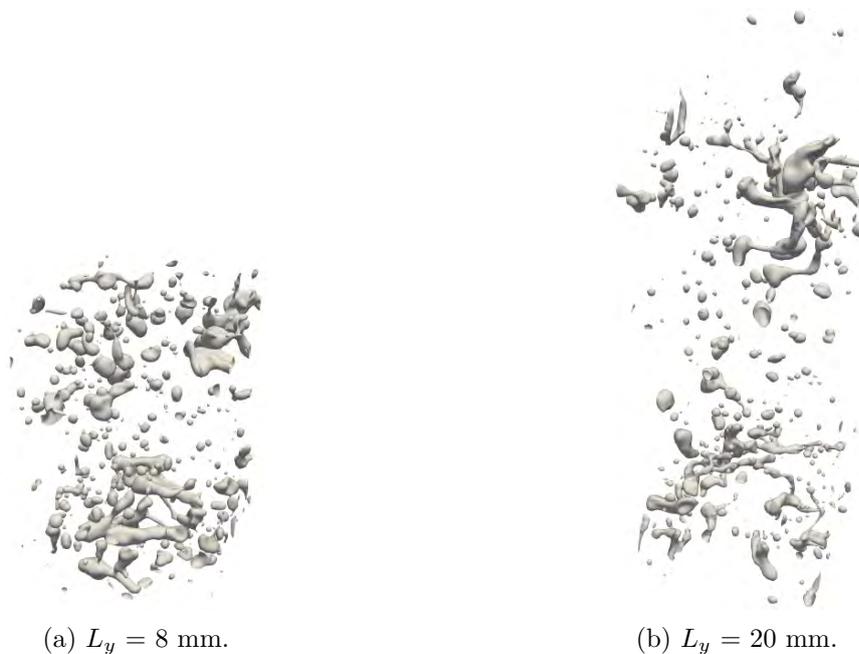


FIGURE 9.11. – Interface à $t^* = 1.9$, influence de la hauteur.

9.3.3. Caractéristiques de l'atomisation

9.3.3.1. Indicateurs globaux

Les taux d'atomisation (taux de conversion en gouttes) démarrent et croissent de la même manière en finissant par atteindre des valeurs maximales de l'ordre de 50 %, Figure 9.12. Cette similitude comportementale illustre un processus d'atomisation global conservé. Néanmoins, un premier différentiel du taux d'atomisation se distingue dès $t^* = 1.3$ et finit par se combler à $t^* = 2.2$. Cet écart, inférieur à 5 %, se retrouve sur l'évolution de la surface liquide totale et correspond aux gouttes supplémentaires produites pour la simulation confinée, Figures 9.9 et 9.10.

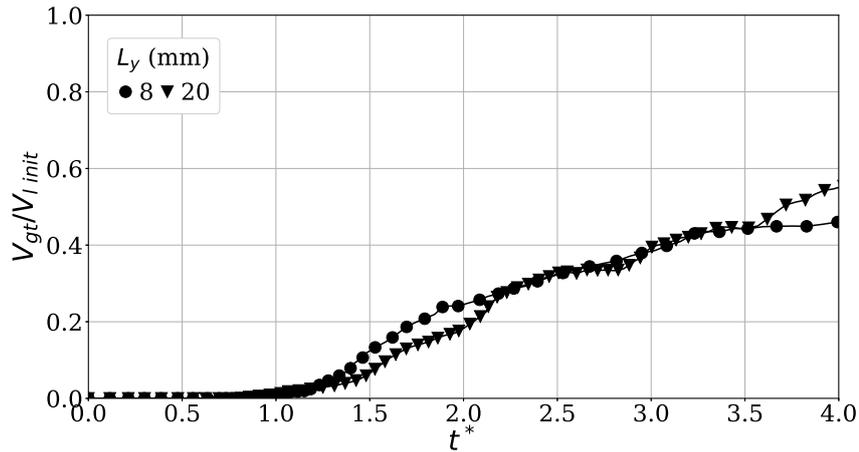


FIGURE 9.12. – Volume total des gouttes, influence de la hauteur.

La surface des gouttes a une évolution décomposable en deux phases, Figure 9.13. La première se déroule jusqu'à $t^* = 2.1$ et illustre une rapide croissance de la surface des gouttes pour les deux simulations. Au-delà, la seconde phase est caractérisée par des taux de croissance plus faibles ainsi que des divergences d'évolution. Ces écarts grandissants illustrent l'influence de la hauteur sur le processus d'atomisation. Le domaine le plus confiné possède une surface variant peu jusqu'à la fin du processus d'atomisation ce qui est à l'opposé du domaine étendu avec sa continuelle augmentation.

Le phénomène de coalescences généralisées peut être déduit des évolutions du volume et de la surface des gouttes, Figures 9.12 et 9.13. Pour $L_y = 8$ mm, ce phénomène intervient dès $t^* \geq 2.0$ avec une surface de gouttes stagnante et un taux d'atomisation croissant. Dans le cas de $L_y = 20$ mm, cet effet intervient plus tardivement, dès $t^* \geq 3.0$, et permet ainsi de retarder ces effets indésirables pénalisant la représentativité des simulations.

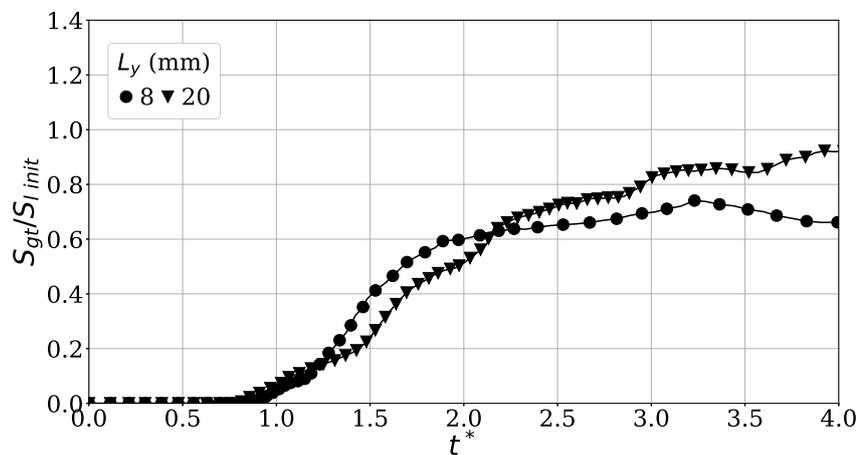


FIGURE 9.13. – Surface totale des gouttes, influence de la hauteur.

9.3.3.2. Indicateurs locaux

La répartition verticale du volume des gouttes illustre l'influence des variations de hauteurs sur le processus d'atomisation, Figure 9.14. Une diminution de hauteur implique, à volume liquide constant, une concentration verticale supérieure du liquide et des gouttes, Figure 9.14c.

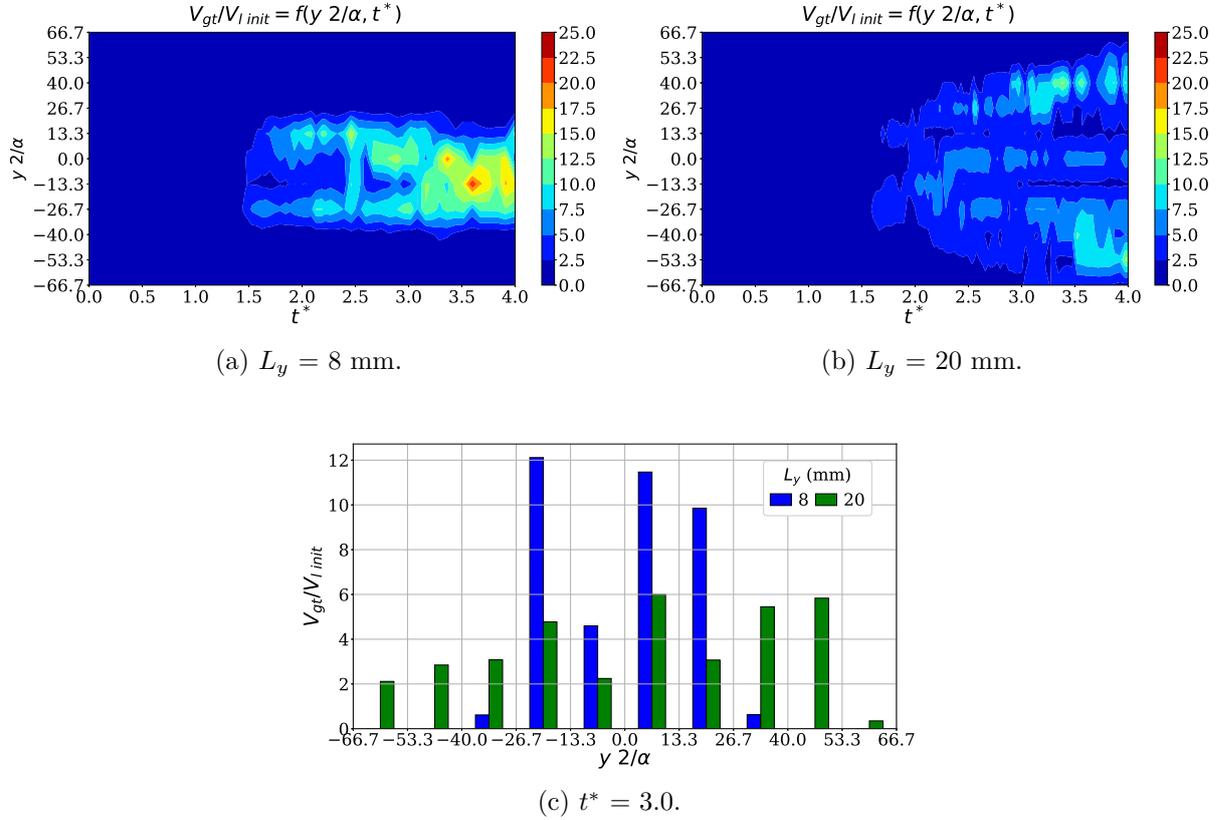


FIGURE 9.14. – Distribution du volume de gouttes par hauteur, influence de la hauteur.

9.3.4. Diamètre caractéristique

Les variations de hauteur du domaine altèrent principalement la phase réductrice du processus d'atomisation et influencent la formation du spray.

Les évolutions du diamètre de Sauter sont globalement croissantes durant tout le processus d'atomisation, Figure 9.15. Néanmoins, les variations de hauteur, couplées aux conditions limites, altèrent ce comportement similaire en favorisant les coalescences forcées et la génération de grosses gouttes. Pour cette raison, des écarts se distinguent et se creusent entre ces deux configurations en fin de simulation, $t^* > 2.5$. Des relevés de diamètre caractéristique sont résumés Table 9.4 pour $t^*_{cmp} = 2.5$ et au temps final, t^*_{fin} .

L_y (mm)	t^*_{cmp}		t^*_{fin}	
	8	20	8	20
d_{32} (μm)	384.3	368.6	543.8	484.4
d_{32}/Δ	12.3	11.8	17.4	15.5

TABLE 9.4. – Relevés des diamètres de Sauter, influence de la hauteur.

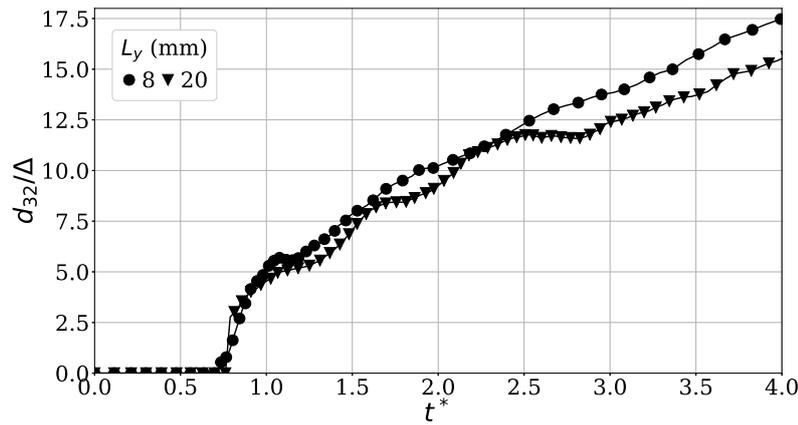


FIGURE 9.15. – Diamètre de Sauter, influence de la hauteur.

9.3.5. Conclusion

Cette étude avait pour objectif d’analyser l’influence des variations de hauteur sur le processus d’atomisation et plus particulièrement leurs impacts sur la représentativité des simulations par rapport à l’expérience.

Tout d’abord, les changements de hauteurs initiales n’influencent pas les débuts du processus d’atomisation. En effet, le développement des grandes échelles est conservé ainsi que le type de fragmentation liquide qui génère les gouttes. Grâce à cela, les sprays sont comparables durant les premiers instants de l’atomisation.

Toutefois, les coalescences forcées induites par les conditions limites se manifestent d’autant plus tôt que la hauteur du domaine est réduite. Les indicateurs globaux illustrent une coalescence généralisée au-travers du volume de goutte qui augmente et de la surface de goutte qui stagne, voire décroît.

Afin de conserver au maximum la représentativité interne des simulations, en limitant l’influence des conditions limites, une hauteur suffisamment grande doit être déterminée. Cette dernière est un compromis entre son rôle : limiter les effets des conditions limites et son coût numérique.

9.4. Conclusion sur l'influence des paramètres géométriques

L'objectif de ce chapitre était d'analyser l'influence de paramètres géométriques tels que la hauteur du domaine ou la résolution, sur le processus d'atomisation. Plus précisément, c'est l'impact de ces paramètres numériques sur la représentativité des simulations qui a dû être vérifié.

Tout d'abord, une trop grande augmentation de résolution implique des coûts de calcul et de temps de restitutions trop importants pour un étude paramétrique. Dans cette première étude, l'objectif est de détecter la sensibilité des grandeurs mesurées aux conditions de simulations et de mettre en place l'analyse couplée par l'algorithme de détection et classification. D'autre part, une grande résolution, couplée aux conditions limites périodiques, favorise les coalescences forcées entre les structures liquides et une sous-estimation de l'atomisation du liquide.

Enfin, les variations de hauteur du domaine peuvent affecter le processus d'atomisation. Afin de préserver la représentativité des simulations, les structures générées durant le processus d'atomisation doivent traverser, le moins possible, les conditions limites verticales. À l'inverse, une hauteur réduite implique une apparition précoce des coalescences forcées tandis qu'une hauteur étendue les retarde. Pour cette raison, le choix final s'est établi à partir d'un compromis entre coût numérique et conservation de la représentativité des simulations au-travers d'une hauteur étendue.

Étude en similitude par rapport à l'expérience

Ce chapitre présente diverses études en similitudes réalisées à partir des points de fonctionnements de Dejean [45].

L'objectif du premier point d'étude, section 10.2, est de retrouver, qualitativement et quantitativement, une atomisation ligamentaire ayant des variations comportementales analogues à celles constatées sur les points d'expériences associés. Cette étude en similitude se base sur la conservation de nombres sans dimension jugés les plus pertinents.

Toutefois, les dépendances entre ces nombres sans dimension ne permettent pas d'établir leurs influences séparées sur le processus d'atomisation. En effet, d'un point de vue expérimental, la variation d'un paramètre tel que la vitesse gaz (U_g) modifie simultanément le MFR , le We et le Re_g . Pour cette raison, l'objectif des points d'études suivant, section A.7, 10.4 et 10.3, est d'identifier les phénomènes associés à chacun de ces nombres grâce à une nouvelle approche complémentaire aux expériences. Pour cela, de nouvelles études paramétriques, basées sur les points de fonctionnement de Dejean [45], ont été menées en analysant les effets induits par chacun de ces nombres indépendamment des autres.

Sommaire

10.1. Introduction	152
10.2. Conservation des couples initiaux $MFR-We$	152
10.2.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	152
10.2.2. Observations des processus d'atomisation	152
10.2.3. Caractéristiques de l'atomisation	154
10.2.3.1. Indicateurs globaux	154
10.2.4. Diamètres caractéristiques	155
10.2.5. Conclusion	156
10.3. Effet du rapport des flux de quantité de mouvements, MFR	158
10.3.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	158
10.3.2. Observations des processus d'atomisation	158
10.3.3. Caractéristiques de l'atomisation	160
10.3.3.1. Indicateurs globaux	160
10.3.4. Diamètre caractéristique	160
10.3.5. Conclusion	161
10.4. Influence du Weber, We	162
10.4.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	162
10.4.2. Observations des processus d'atomisation	162
10.4.3. Caractéristiques de l'atomisation	164
10.4.3.1. Indicateurs globaux	164
10.4.4. Diamètres caractéristiques	165
10.4.5. Conclusion	166
10.5. Conclusion des études réalisées en similitude par rapport aux expériences	167

10.1. Introduction

Les simulations réalisées dans ce chapitre ont toutes utilisé le même domaine géométrique et le même maillage que dans l'étude du cas de référence, section 8.3.

D'autre part, les conditions initiales de chacune de ces études ont été obtenues grâce aux nombres sans dimension retenus et en s'aidant de la méthodologie de similitude, section 6.4.

Toutes ces études se basent sur une procédure d'analyse identique à celle employée pour le cas de référence. Cette dernière permet de mesurer qualitativement et quantitativement les variations présentes dans les processus d'atomisation reproduits. Toutefois, seules les informations les plus pertinentes sont présentées sections 10.2, 10.3 et 10.4 avec celles complémentaires en annexe A.4, A.5 et A.6. De plus, l'étude complète sur le rapport de densité $\hat{\rho}$ a été mise en annexe A.7 car les variations de ce paramètre impliquaient une multitude de changements et des résultats non concluants.

10.2. Conservation des couples initiaux $MFR-We$

Cette étude analyse les processus d'atomisation reproduits en similitude à partir de la conservation des nombres sans dimension $MFR-We$ issus d'expériences. L'augmentation de ces derniers représente, d'un point de vue expérimental, un accroissement du débit d'air entrant et agit sur le processus d'atomisation en l'intensifiant. Dans cette configuration périodique, les mêmes phénomènes ainsi que les mêmes variations sont attendus au-travers de la conservation de ces nombres.

10.2.1. Nombres sans dimension et conditions initiales

Afin de reproduire une atomisation ligamentaire cohérente avec les points de fonctionnement de Dejean [45] Table 6.1, un maximum de nombres sans dimension ont été maintenus à partir de la Table 6.2.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
		1581.1	11.52		0.75
$1.2 \cdot 10^{-2}$	598.8	1897.3	16.82	$1.79 \cdot 10^{-2}$	1.08
		2213.6	23.12		1.47

TABLE 10.1. – Nombres sans dimension utilisés, variations des couples $MFR-We$.

ρ_g	U_g	μ_g	ρ_l	U_l	μ_l	σ
	15.8					$5.9 \cdot 10^{-2}$
12	18.9	$1.8 \cdot 10^{-5}$	10^3	2	10^{-3}	$6.1 \cdot 10^{-2}$
	22.1					$6.3 \cdot 10^{-2}$
kg/m^3	m/s	Pa s	kg/m^3	m/s	Pa s	N/m

TABLE 10.2. – Conditions initiales utilisées, variations des couples $MFR-We$.

10.2.2. Observations des processus d'atomisation

L'utilisation de ce temps adimensionnel, t^* , permet de faire collapser les courbes dans la phase de production induites par les développements des grandes échelles, $t^* \leq 0.75$, Figure 10.1. Seul le maximum de surface atteint varie, de manière cohérente, en fonction des nombres sans dimension

initiaux. Enfin, la valeur asymptotique de surface finale semble reliée au couple $MFR-We$ initial laissant présager une influence de ces derniers sur le spray final.

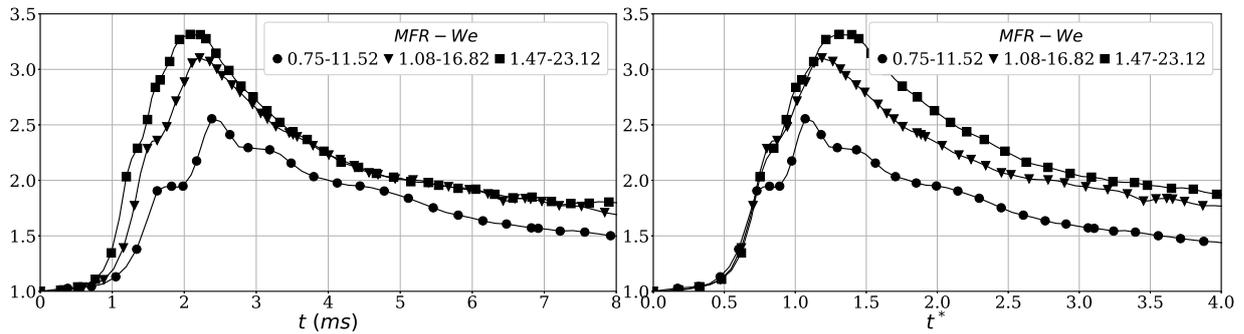
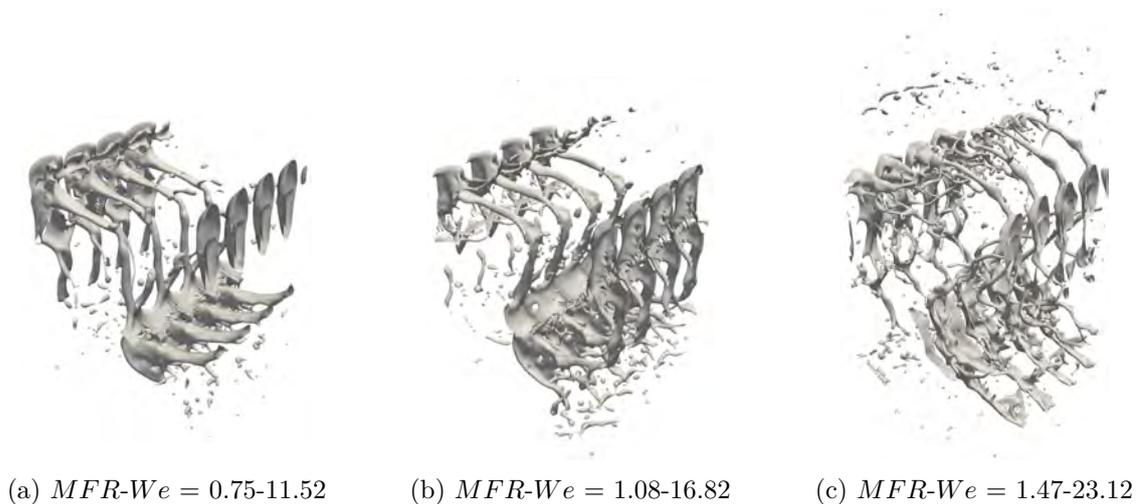


FIGURE 10.1. – Évolution de la surface liquide en fonction de t et t^* , variations des couples $MFR-We$.

Dans l’atomisation assistée, le cisaillement est le principal moyen de transférer de l’énergie de la phase gazeuse à la phase liquide. Pour cette raison, une augmentation du couple initial $MFR-We$ signifie une plus grande quantité d’énergie apportée à la phase liquide. Ce surplus d’énergie explique que les profils liquides deviennent de plus en plus perturbés et que le nombre de structures détachées s’accroît, Figure 10.2.

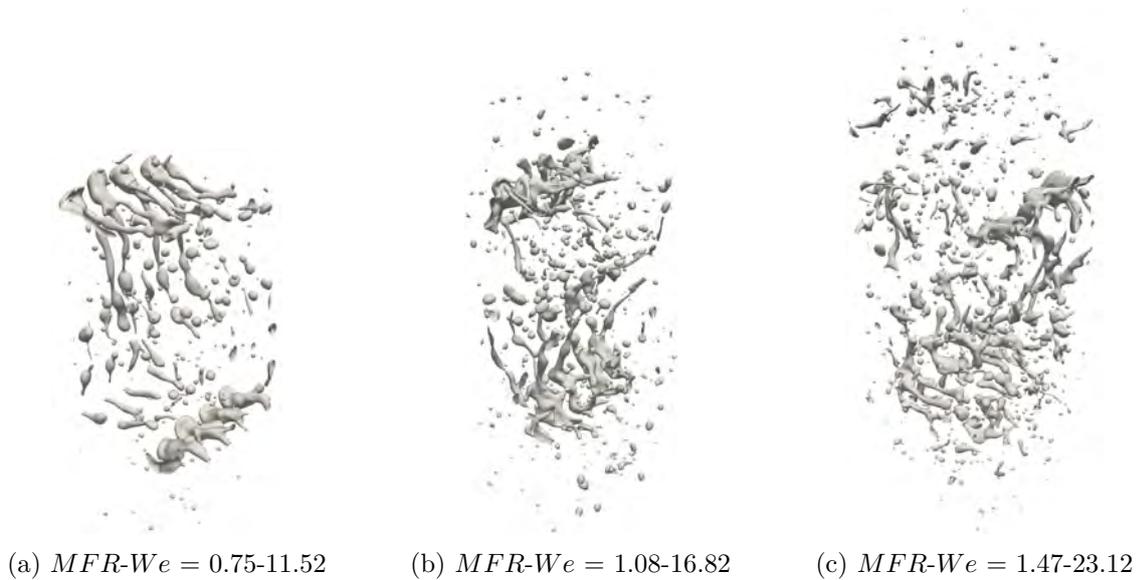
La rupture de pente présente sur la surface liquide totale, qui est associée dans le cas de référence à une cassure de membrane, s’atténue jusqu’à disparaître lorsque le couple $MFR-We$ augmente, Figure 10.1. Or, cette destruction brutale de surface est toujours visible dans le processus d’atomisation, Figure 10.2. Cela signifie que durant cette phase réductrice de surface (rupture membrane), l’augmentation du couple $MFR-We$ compense cette perte de surface par une nouvelle surproduction. Ce phénomène se constate sur les images instantanées de l’interface avec une complexification croissante de la topologie de l’interface et l’apparition de nouvelles petites structures détachées liquides lorsque le couple $MFR-We$ s’accroît.



(a) $MFR-We = 0.75-11.52$ (b) $MFR-We = 1.08-16.82$ (c) $MFR-We = 1.47-23.12$

FIGURE 10.2. – Interface à $t^* = 1.1$, variations des couples $MFR-We$.

Ce surplus d’énergie initiale impacte l’ensemble du processus d’atomisation, depuis la phase réductrice de surface liée à la stabilisation des structures et jusqu’à la génération du spray, Figure 10.3. Le nombre de structures générées ainsi que l’encombrement vertical global s’accroissent avec $MFR-We$, ce qui démontre une plus importante pulvérisation. Les larges et volumineux amas présents dans les simulations les moins énergétiques, Figure 10.3a, deviennent plus nombreux et plus petits lorsque ces nombres sans dimension augmentent, Figure 10.3c.

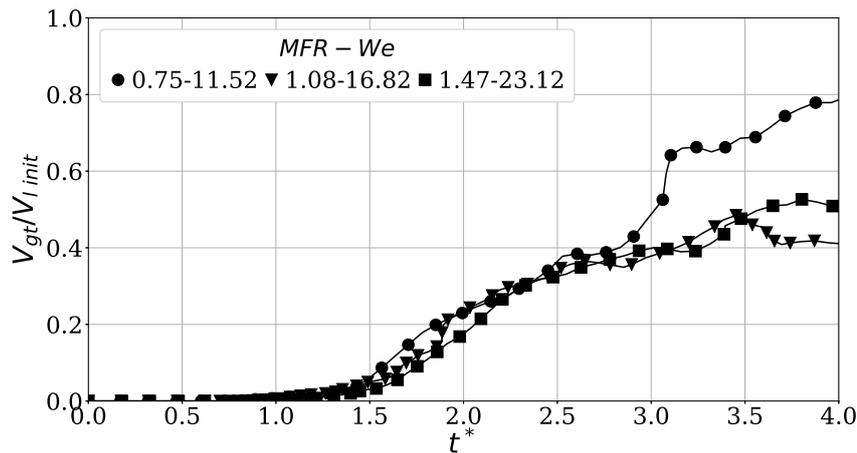

 FIGURE 10.3. – Interface à $t^* = 1.9$, variations des couples $MFR-We$.

10.2.3. Caractéristiques de l'atomisation

10.2.3.1. Indicateurs globaux

Les taux d'atomisation sont proches et évoluent de manière analogue jusqu'à atteindre 40 % du volume initial, Figure 10.4. Au-delà, seule la simulation la moins énergétique, $MFR-We = 0.75-11.52$, se démarque avec une brusque augmentation du volume de goutte et une rupture de pente visible à $t^* = 3.1$.

Cette soudaine détection de volume de goutte laisse présager une fin de conversion en gouttes d'une ou plusieurs larges structures, potentiellement influencées par les conditions périodiques. En effet, sans cette rupture de pente, les taux d'atomisation continueraient de se confondre avec un maximum atteint de 50 %. De plus, la conversion générale du liquide en gouttes semble ralentir en fin d'atomisation ($t^* > 3.0$).


 FIGURE 10.4. – Volume total des gouttes, variations des couples $MFR-We$.

Les évolutions de surface totale des gouttes, couplées avec les évolutions de volumes, renseignent sur les topologies des sprays produits, Figure 10.5.

La première simulation, $MFR-We = 0.75 - 11.52$, possède un volume de gouttes similaire avec les deux autres jusqu'à $t^* = 3.0$. Cependant sa surface totale de gouttes plus basse signifie que son spray généré est composé de gouttes plus larges. A contrario, les deux autres points de fonctionnement, ne se distinguent pas réellement entre eux, puisque leurs volumes de gouttes et

leurs surfaces totales de gouttes sont très proches.

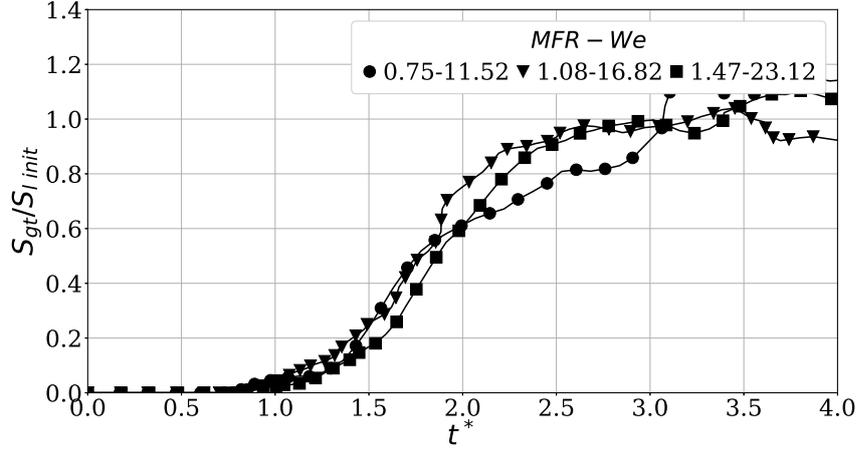


FIGURE 10.5. – Surface totale des gouttes, variations des couples $MFR-We$.

10.2.4. Diamètres caractéristiques

Les variations du diamètre moyen, en fonction des nombres $MFR-We$, donnent des informations pertinentes sur les constitutions des sprays. Pour différents instants de comparaison, notamment avec $t^*_{cmp} = 2.5$, les valeurs des diamètres moyens conservent le même classement en fonction de l'énergie initiale, Table 10.3. La première simulation, $MFR-We = 0.75-11.52$, possède une valeur plus élevée que pour les deux autres, et ainsi de suite, Figure 10.6. Sachant que les évolutions ainsi que les valeurs atteintes du volume de gouttes sont équivalentes durant une large partie du processus d'atomisation, ce classement démontre que les simulations les plus énergétiques possèdent un plus grand nombre de petites gouttes.

$MFR-We$	t^*_{cmp}			t^*_{fin}		
	0.75-11.52	1.08-16.82	1.47-23.12	0.75-11.52	1.08-16.82	1.47-23.12
d_{10} (μm)	276.1	252.7	234.1	318.3	271.4	262.1
d_{10}/Δ	5.9	5.4	5.0	6.8	5.8	5.6

TABLE 10.3. – Comparaison des diamètres moyens, variations des couples $MFR-We$.

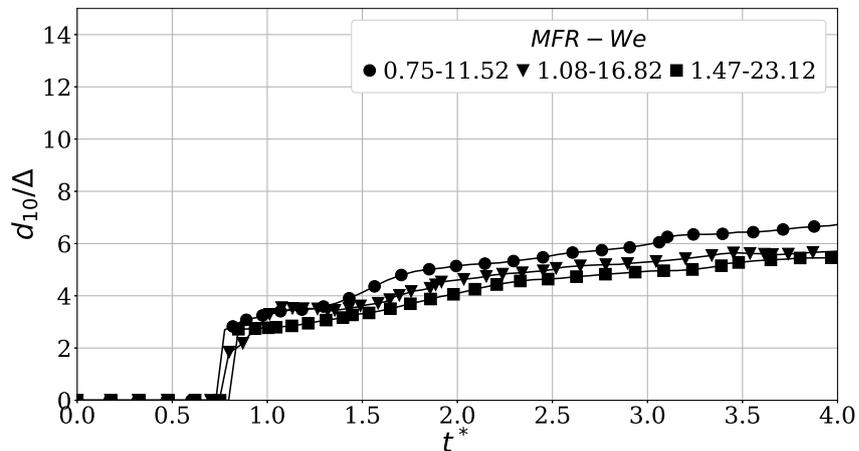


FIGURE 10.6. – Diamètre moyen, variations des couples $MFR-We$.

Le diamètre de Sauter est en revanche plus sensible aux gouttes de taille plus importante, et montre une séparation plus nette entre la première simulations et celles à $MFR-We$ plus élevés, Figure 10.7.

Un plateau se dessine dès $t^* > 3.0$, pour les deux dernières simulations, qui découle d'évolutions stagnantes en volume et surface, Figures 10.4 et 10.5. À l'inverse, la première simulation possède une élévation de ce diamètre au même instant qui signifie la détection de larges gouttes stabilisées par la tension de surface et les conditions périodiques.

Pour s'abstenir des biais induits par les coalescences généralisées l'instant de comparaison est conservé à sa valeur initiale, ($t^*_{cmp} = 2.5$) pour ces trois points de fonctionnements. Les relevés des simulations sont résumés Table 10.4 avec ceux correspondants de Dejean [45].

	t^*_{cmp}			Dejean [45]		
$MFR-We$	0.75-11.52	1.08-16.82	1.47-23.12	0.75-11.52	1.08-16.82	1.47-23.12
d_{32} (μm)	428	324	300	214	162	136
d_{32}/Δ	9.2	6.8	6.4	4.6	3.4	2.9

TABLE 10.4. – Relevés des diamètres de Sauter, variations des couples $MFR-We$.

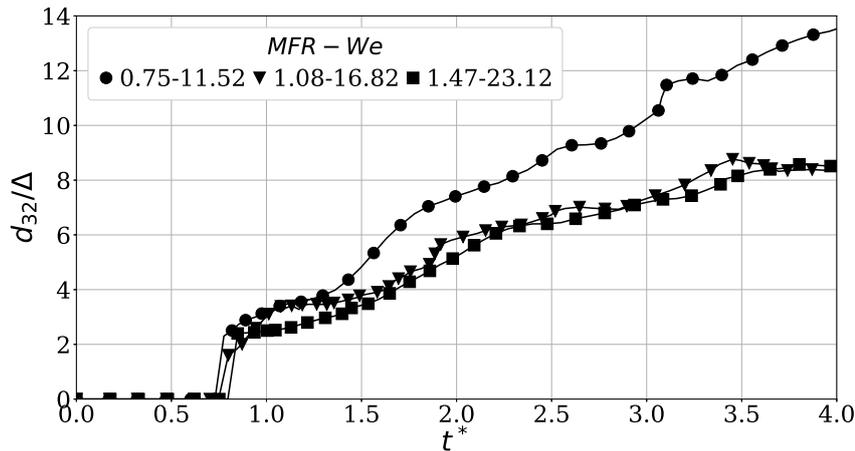


FIGURE 10.7. – Diamètre de Sauter, variations des couples $MFR-We$.

Quelque soit le point de configuration, de grands écarts sont présents entre la simulation et la mesure d'expérience. Ces écarts, de l'ordre des 100 %, illustrent la difficulté des simulations d'atomisations périodiques, pour cette géométrie et ce maillage, à obtenir un tel diamètre.

10.2.5. Conclusion

L'objectif de ce point d'investigation était d'analyser les variations induites par les couples sans dimension $MFR-We$ sur le processus d'atomisation et de les comparer aux points de fonctionnements expérimentaux équivalents.

L'utilisation d'un temps caractéristique dépendant des nombres sans dimension a permis de faire correspondre les différentes phases caractéristiques de l'atomisation, quelque soit le couple $MFR-We$ initial. Cette nouvelle formulation a mis en évidence l'influence spécifique du rapport des flux de quantité de mouvements sur le temps caractéristique du processus d'atomisation en configuration périodique.

Le cisaillement étant le mécanisme de transfert d'énergie de la phase gazeuse à celle liquide, une augmentation de son énergie initiale (au-travers du couple $MFR-We$) induit une topologie liquide plus perturbée et donc une multiplication de création d'amas.

La meilleure pulvérisation induite par l'augmentation du $MFR-We$ accroît le nombre de petites structures et donc de gouttes. Sachant que les taux d'atomisations sont quasiment similaires, cet apport d'énergie implique que les sprays se composent de plus en plus de petites gouttes.

La comparaison des diamètres de Sauter avec les mesures d'expériences de Dejean [45] est encore à ce stade prématurée en raison des hypothèses simplificatrices et de la résolution de la simulation.

Plusieurs raisons peuvent expliquer de telles différences. Tout d'abord, la résolution des simulations implique que les diamètres de Sauter de Dejean [45] sont presque en limites de résolution pour le maillage employé, Table 10.4. Une deuxième explication peut venir des hypothèses faites concernant les longueurs d'onde excitées. L'étude de convergence en maillage a démontré qu'une erreur sur celles-ci peut entraîner d'importantes différences sur l'évolution de la déformation de la nappe. Enfin, cet écart avec l'expérience peut provenir d'un trop faible taux d'atomisation pour le temps d'analyse choisi, $V_{gt}/V_{l\ init} \approx 39\%$. La majorité du liquide n'a pas pu se transformer en gouttes et ainsi la mesure de ce diamètre caractéristique est réalisée sur un échantillon de gouttes trop restreint.

Bien que cette comparaison soit infructueuse, une sensibilité de la taille caractéristique des gouttes générées par l'atomisation aux paramètres initiaux a été détectée. Une évaluation de cette sensibilité sera présentée par la suite.

10.3. Effet du rapport des flux de quantité de mouvements, MFR

Cette étude explore l'influence du rapport de flux de quantité de mouvements sur le processus d'atomisation en configuration périodique, indépendamment des autres nombres sans dimension. L'objectif est d'identifier les phénomènes ne dépendant que du MFR lors du processus d'atomisation.

10.3.1. Nombres sans dimension et conditions initiales

Pour réaliser cela, toutes les valeurs du MFR sont reprises à partir des points de fonctionnement de Dejean [45]. Les nombres sans dimension restants correspondent à ceux du cas de référence, Table 8.3, hormis le Weber fixé à la plus haute valeur disponible de la base des données, Table 6.2.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
		1581.1			0.75
$1.2 \cdot 10^{-2}$	598.8	1888.5	23.12	$1.79 \cdot 10^{-2}$	1.08
		2213.6			1.47

TABLE 10.5. – Nombres sans dimensions utilisés, effet du MFR .

ρ_g	U_g	μ_g	ρ_l	U_l	μ_l	σ
	15.8					$2.9 \cdot 10^{-2}$
12	18.9	$1.8 \cdot 10^{-5}$	10^3	2	10^{-3}	$4.4 \cdot 10^{-2}$
	22.1					$6.3 \cdot 10^{-2}$
kg/m^3	m/s	Pa s	kg/m^3	m/s	Pa s	N/m

TABLE 10.6. – Conditions initiales utilisées, effet du MFR .

10.3.2. Observations des processus d'atomisation

Les évolutions de surfaces liquides intégrales illustrent des courbes similaires, quoique avec des temps caractéristiques différents. L'emploi du temps caractéristique t^* permet de rassembler ces courbes indépendamment de la phase du processus d'atomisation, Figure 10.8.

Les faibles écarts d'amplitude visibles entre les surfaces liquides démontrent le peu d'influence du rapport des flux de quantités de mouvements sur la production de surface, à Weber fixe. Ce comportement illustre l'impact du rapport des flux de quantités de mouvements sur le temps caractéristique du processus d'atomisation et, a contrario, sa faible influence sur la quantité de surface produite.

La proximité entre les courbes de surface liquide lors des premiers instants de l'atomisation assure que les topologies liquides sont similaires. Peu de structures volumineuses sont générées dans cet intervalle ce qui implique que la nappe liquide possède, à peu de chose près, la même quantité de surface.

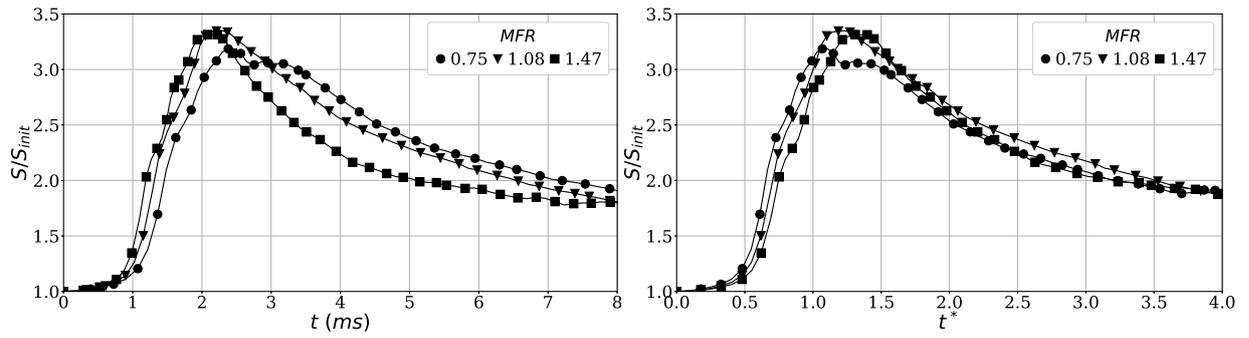


FIGURE 10.8. – Évolution de la surface liquide en fonction de t et t^* , effet du MFR .

Ce comportement similaire entre les processus d'atomisation se prolonge Figure 10.9. Bien que les ruptures de membranes se soient produites, les topologies liquides sont analogues. Les seules différences visibles concernent un écart d'amplitude verticale de la nappe liquide.

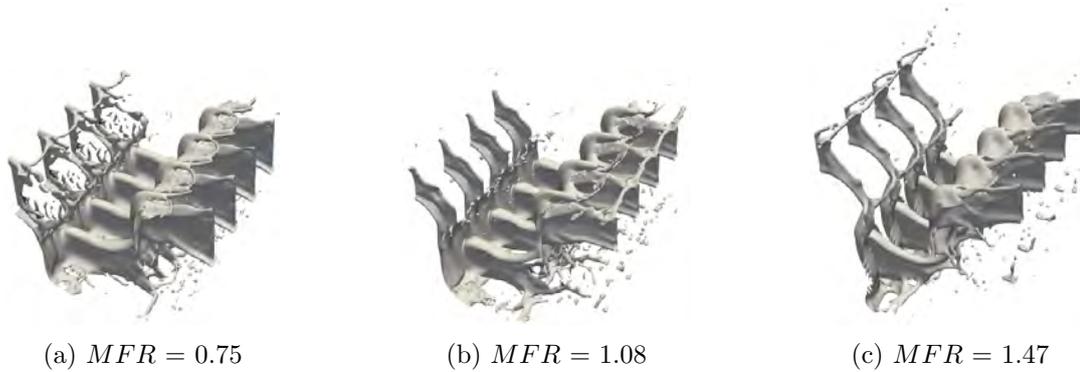


FIGURE 10.9. – Interface à $t^* = 0.9$, effet du MFR .

Les sprays générés, au-travers de leur grand nombre de structures, sont caractéristiques d'une valeur de Weber initiale élevée, Figure 10.10. La dispersion verticale du liquide semble supérieure lorsque le MFR augmente, Figures 10.10a et 10.10c.

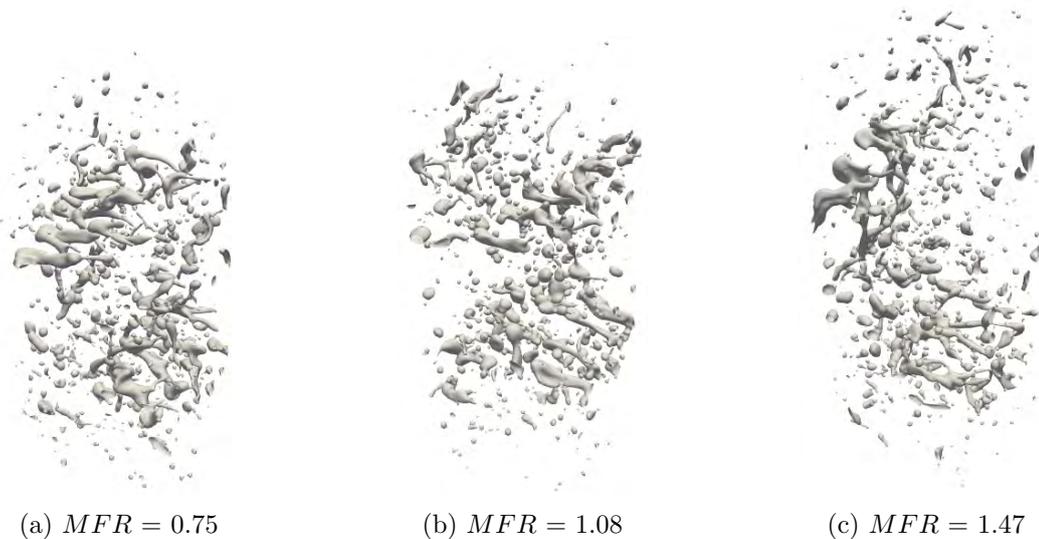


FIGURE 10.10. – Interface à $t^* = 2.0$, effet du MFR .

10.3.3. Caractéristiques de l'atomisation

10.3.3.1. Indicateurs globaux

Cette similitude comportementale entre les simulations se poursuit via les taux d'atomisation, Figure 10.11, et les évolutions de surface des gouttes, Figure 10.12.

Les taux d'atomisation ont des évolutions très proches durant une large partie du processus d'atomisation, $t^* < 3.0$. Au-delà, des premiers écarts se creusent, sûrement induits par les effets de bord des conditions limites.

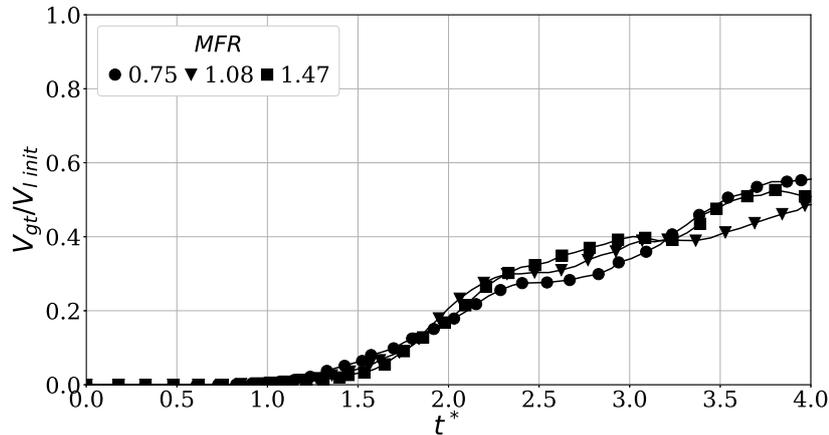


FIGURE 10.11. – Volume total des gouttes, effet du MFR .

Les surfaces des gouttes présentent des évolutions comportementales similaires, Figure 10.12. Cela implique, en plus d'avoir une quantité de volume très proches durant la majeure partie du processus d'atomisation, que ces trois simulations possèdent des sprays similaires, d'un point de vue intégral.

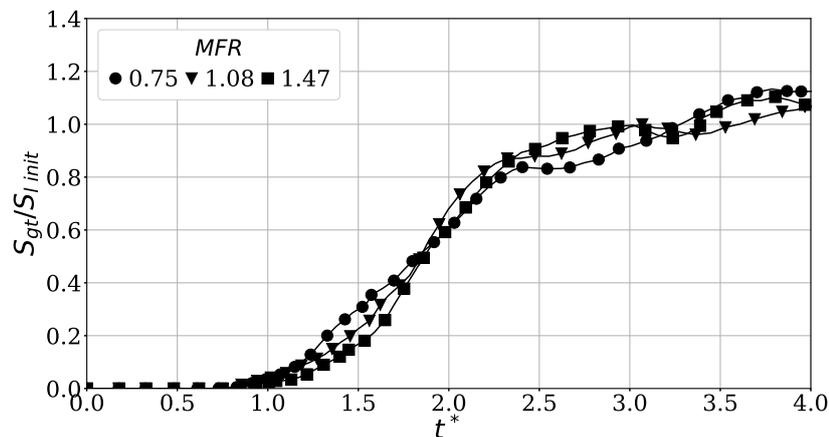


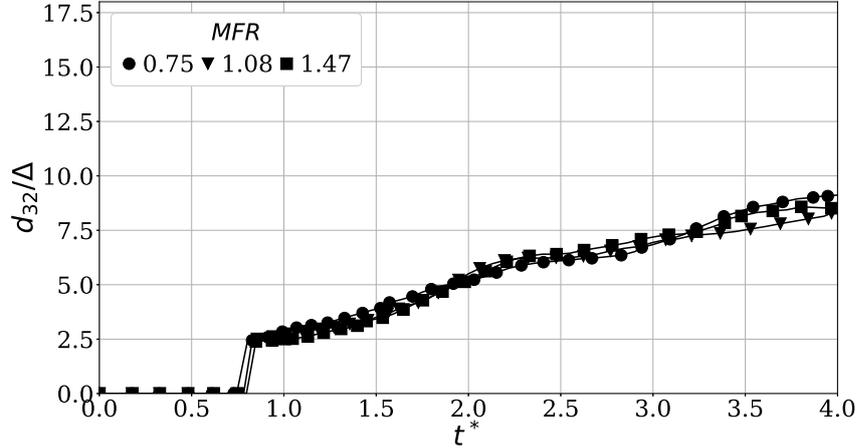
FIGURE 10.12. – Surface totale des gouttes, effet du MFR .

10.3.4. Diamètre caractéristique

L'augmentation du rapport des flux de quantité de mouvements influence peu la magnitude des phénomènes présents dans cette configuration simplifiée et pour ce processus d'atomisation.

Le diamètre caractéristique de Sauter, n'est que peu influencé par les variations du MFR , Figure 10.13. Ce constat découle du volume et de la surface intégrale des gouttes qui sont relativement proches, quel que soit l'instant d'analyse. Les relevés de ce diamètre sont résumés Table 10.7.

	t^*_{cmp}			t^*_{fin}		
MFR	0.75	1.08	1.47	0.75	1.08	1.47
d_{32} (μm)	285.5	287.8	292.5	425.9	393.1	397.8
d_{32}/Δ	6.1	6.15	6.25	9.1	8.4	8.5

 TABLE 10.7. – Relevés des diamètres de Sauter, effet du MFR .

 FIGURE 10.13. – Diamètre de Sauter, effet du MFR .

10.3.5. Conclusion

Cette étude paramétrique analyse l'influence du rapport des quantités de mouvements, découplée du Weber, sur le processus d'atomisation en configuration périodique.

Les conditions initiales furent établies pour permettre la variation du MFR indépendamment des autres nombres sans dimension.

La normalisation par un temps caractéristique a permis de comparer des processus d'atomisation se déroulant à des échelles temporelles différentes. Ceci démontre et confirme l'influence de ce nombre sans dimension sur le temps caractéristique d'un tel processus, dans cette configuration géométrique. À l'opposé, peu d'influence de ce nombre n'apparaît sur la production de surface ainsi que la génération de gouttes en nombre comme en volume.

Cette constatation complète les observations expérimentales qui relient le MFR au contrôle de la taille des gouttes. En effet, une atomisation plus importante due aux surplus d'énergie fournie par le gaz est attendue

Cependant, les dispositifs expérimentaux ne peuvent que difficilement réaliser des variations du MFR indépendamment du We . Le section suivante s'intéressera plus précisément aux variations de Weber, permettant de compléter cette analyse.

10.4. Influence du Weber, We

Cette nouvelle étude paramétrique explore l'influence du Weber sur le processus d'atomisation en configuration périodique, indépendamment des autres nombres sans dimension.

10.4.1. Nombres sans dimension et conditions initiales

Pour réaliser cela, toutes les valeurs de Weber sont reprises à partir des points de fonctionnement de Dejean [45] tandis que les nombres sans dimension restants correspondent à ceux du cas de référence, Table 8.3.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
			23.12		
$1.2 \cdot 10^{-2}$	598.8	1581.1	16.82	$1.79 \cdot 10^{-2}$	0.75
			11.52		

TABLE 10.8. – Nombres sans dimension utilisés, étude du We .

ρ_g	U_g	μ_g	ρ_l	U_l	μ_l	σ
						$2.9 \cdot 10^{-2}$
12	15.8	$1.8 \cdot 10^{-5}$	10^3	2	10^{-3}	$4.1 \cdot 10^{-2}$
						$5.9 \cdot 10^{-2}$
kg/m ³	m/s	Pa s	kg/m ³	m/s	Pa s	N/m

TABLE 10.9. – Conditions initiales utilisées, étude du We .

10.4.2. Observations des processus d'atomisation

La coïncidence de chacune des phases de l'atomisation, quel que soit le Weber, démontre l'indépendance des temps caractéristiques de ce processus au Weber, Figure 10.14. En effet, ce temps est adimensionné par plusieurs nombres sans dimension et constantes, MFR , $\hat{\rho}$, indépendamment du We , équation (8.8). Les variations du Weber influencent les valeurs de surfaces atteintes dans chacune des phases caractéristiques des processus d'atomisation. L'augmentation de cette quantité peut être assimilée à un surcroît de production de surface global. Ainsi, le plateau de surface représenté par la rupture de membrane s'estompe au fur et à mesure que le Weber augmente, à cause de cet excédent de production surface. Ceci reste vrai pour le maximum de surface atteint ainsi que pour toute la phase de réduction de surface correspondant à la stabilisation du spray.

Les faibles variations d'évolution des courbes de surfaces liquides totales confirment que les développements des grandes échelles ne sont que peu influencés par les variations initiales du Weber.

L'influence du Weber est notable dans le nombre de structures détachées présentes dans le domaine, grandissant avec le Weber, ainsi qu'au-travers de la topologie des structures liquides, Figure 10.15. Les ligaments reliant les deux parties de la nappe liquide initiale disparaissent lorsque le Weber croît, Figures 10.15a 10.15b et 10.15c. La topologie interne du liquide devient de plus en plus perturbée avec l'ajout d'une multitude de structures détachées qui contribuent à la production de surface visible sur les courbes Figure 10.14. Ces visualisations font suite à la rupture liquide de type membrane qui dépend de la taille de la maille (ici constante) et de la force de rappel du liquide, représentée par la tension de surface. Pour rappel, dans cette étude le MFR est constant, ce qui implique qu'une augmentation du Weber signifie une diminution de

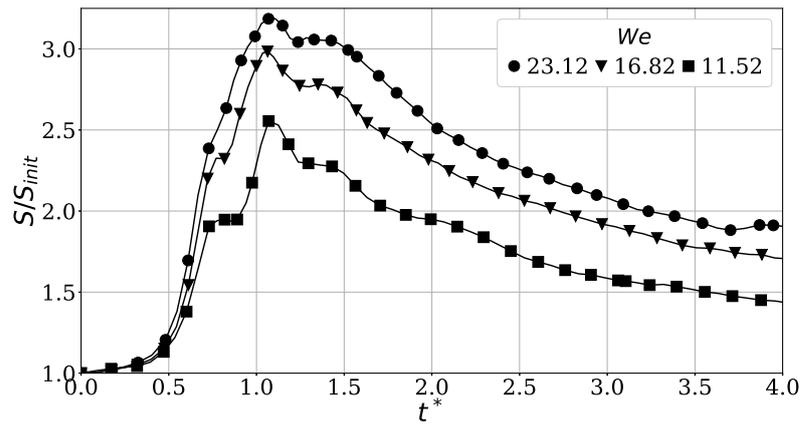


FIGURE 10.14. – Évolution de la surface liquide, étude du We .

la tension de surface. Or, cette chute entraîne une baisse d'intensité dans la force de rappel du liquide et ainsi permet la génération d'un plus grand nombre de petites structures liquides.

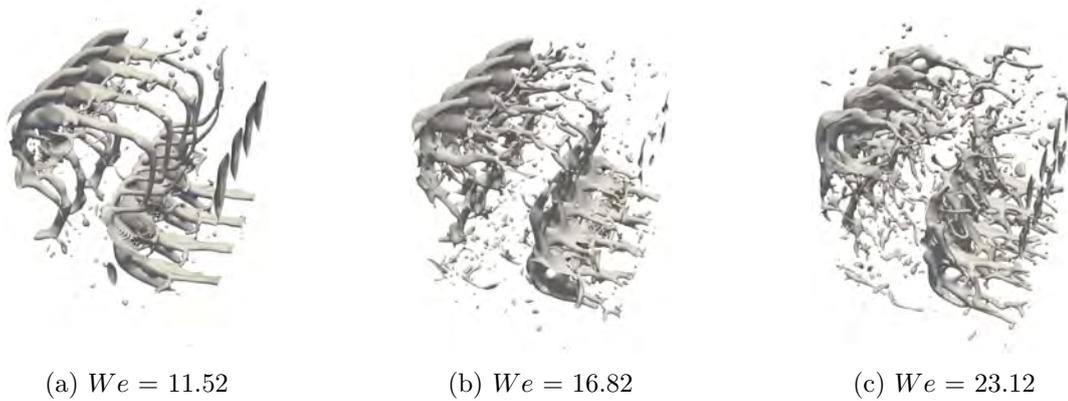


FIGURE 10.15. – Interface à $t^* = 1.1$, étude du We .

Le nombre de structures visibles continue d'être croissant en fonction du Weber alors que la taille ainsi que le volume de ces dernières diminuent, Figure 10.16.

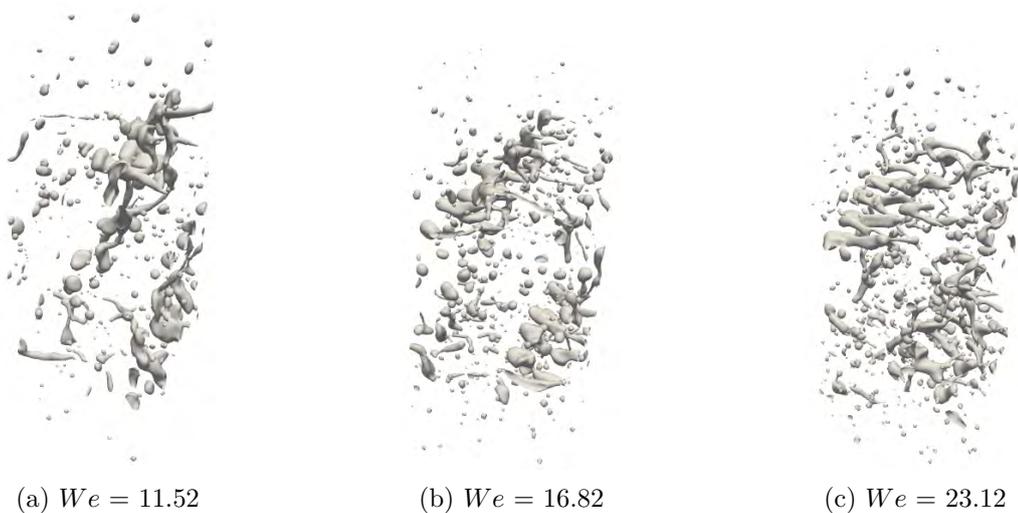


FIGURE 10.16. – Interface à $t^* = 2.0$, étude du We .

10.4.3. Caractéristiques de l'atomisation

10.4.3.1. Indicateurs globaux

Le premier des indicateurs, le nombre de gouttes détecté, conforte les premières remarques émises précédemment, à savoir l'augmentation du nombre de gouttes avec le Weber, Figure 10.17. Bien que les taux de production soient proches, le maximum de gouttes produites grandit avec le Weber. De plus, passé ce maximum, le domaine géométrique étant plus ou moins rempli de gouttes, les conditions limites renforcent les taux de destruction au-travers des coalescences forcées.

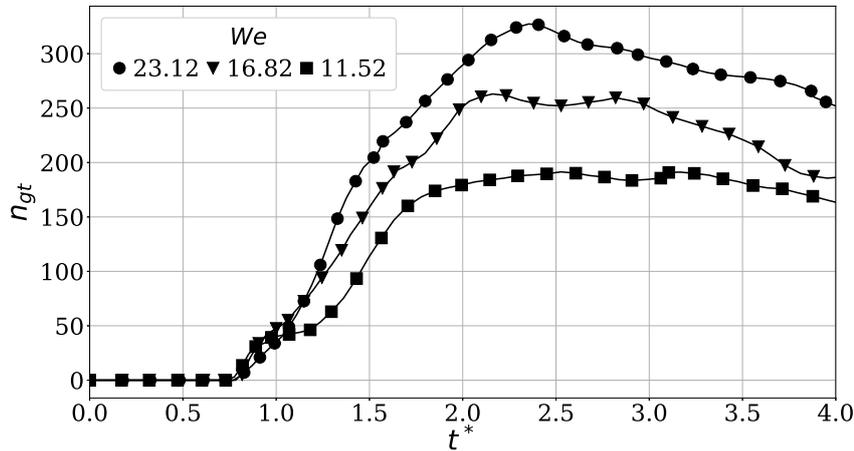


FIGURE 10.17. – Nombre total de gouttes, étude du We .

Bien que les croissances des taux d'atomisation soient similaires jusqu'à $t^* = 2.3$, instant associé aux maximums de gouttes présents dans le domaine, des écarts entre ces taux d'atomisation se creusent au-delà, Figure 10.18. Ces derniers reflètent les impacts du changement de Weber via une conversion et détection des structures liquides en goutte plus lente sous l'action d'une force de tension superficielle réduite.

Cette réduction du temps de conversion des amas en gouttes peut dégrader la représentativité de la simulation par rapport à l'expérience. Les plus volumineuses structures, potentiellement générées par les conditions limites, peuvent être converties et détectées en gouttes bien trop tôt.

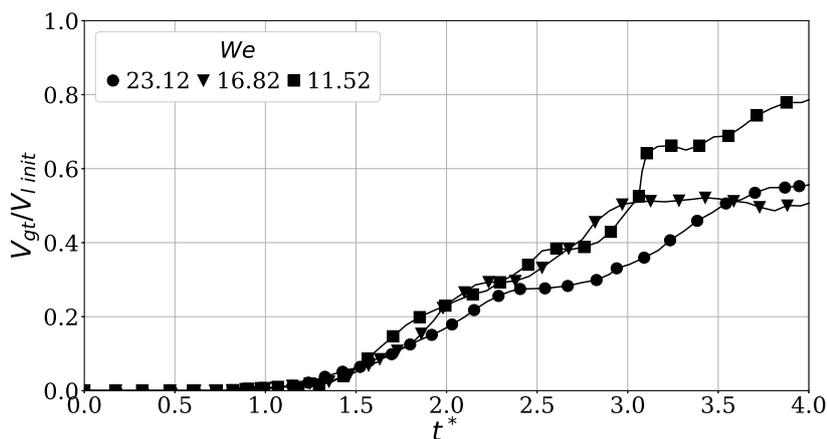


FIGURE 10.18. – Volume total des gouttes, étude du We .

La surface totale des gouttes, couplée avec leur volume et leur nombre de gouttes illustre l'influence du Weber sur le spray généré, Figures 10.17, 10.18 et 10.19. Dans un premier temps, $t^* \leq 2.5$, les valeurs du volume et de surface des gouttes sont similaires, quel que soit le Weber, ce qui est à l'opposé du nombre de gouttes, qui croît avec ce dernier. Ces comportements démontrent une présence de petites gouttes qui s'accroît avec ce nombre sans dimension. Juste après cet

intervalle, $2.5 < t^* \leq 3.0$, la surface des gouttes stagne quel que soit le Weber initial. En parallèle, le volume des gouttes continue de s'élever tandis que leur nombre chute. Toutes ces observations indiquent un début de coalescence généralisée des gouttes et constitue donc une limite temporelle pour juger de la représentativité des simulations.

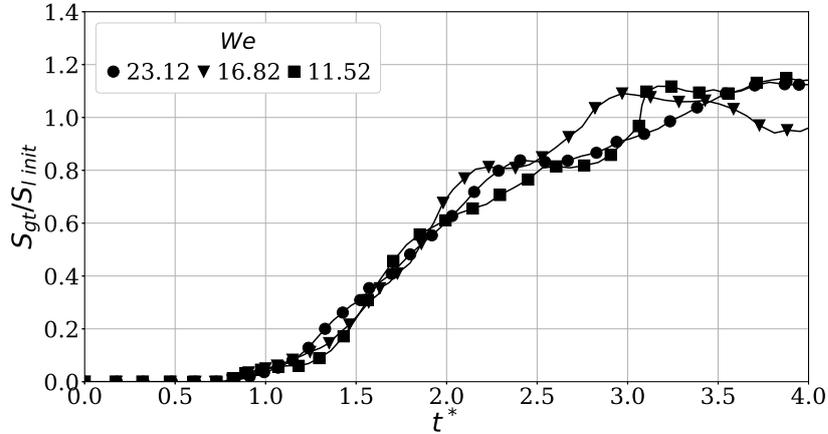


FIGURE 10.19. – Surface totale des gouttes, étude du We .

10.4.4. Diamètres caractéristiques

L'évolution du diamètre de Sauter est décomposable en deux parties, Figure 10.20. Lorsque $t^* < 1.5$, le volume de goutte généré est faible, l'influence du Weber n'est pas significative ce qui explique que toutes les valeurs du diamètre de Sauter sont proches. Au-delà de cet instant, $t^* \geq 1.5$, les écarts entre les simulations se distinguent et s'accroissent au cours de la simulation. Cela est provoqué par l'augmentation des volumes liquides convertis en gouttes ainsi que par le Weber qui influence leurs tailles. Plus le Weber est grand, plus de larges et volumineuses gouttes sont produites et inversement.

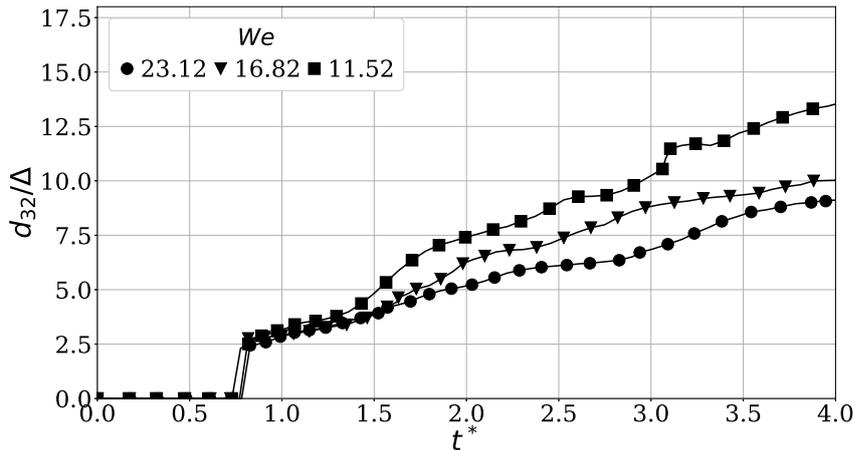
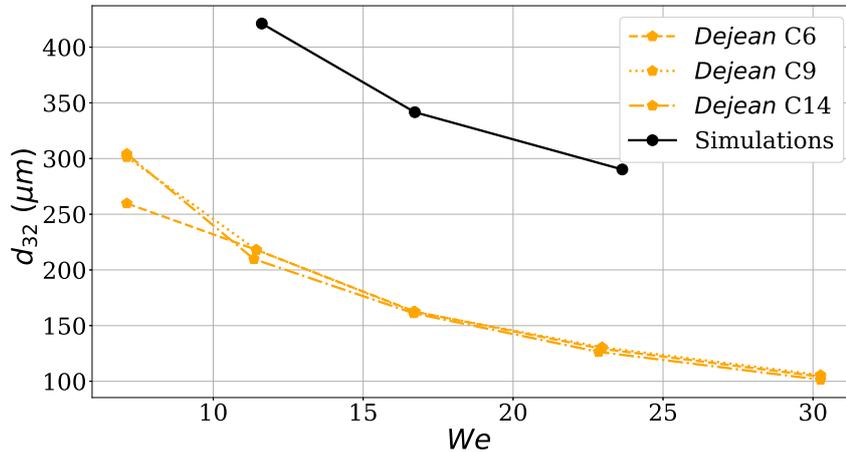


FIGURE 10.20. – Diamètre Sauter, étude du We .

Une comparaison qualitative avec les résultats de Dejean [45] a été effectuée en relevant le d_{32} à $t^*_{cmp} = 2.5$. Cet instant est un bon compromis entre l'avancement du processus d'atomisation et la représentativité des simulations, Table 10.10.

Bien que les écarts relatifs soient importants, de l'ordre de 100 %, ces derniers sont conservés, quel que soit le point de fonctionnement. Autrement dit, bien qu'un décalage soit présent la tendance d'évolution de ce diamètre caractéristique est correctement respectée, Figure 10.21.

	t^*_{cmp}			t^*_{fin}			Dejean [45]		
We	11.52	16.82	23.12	11.52	16.82	23.12	11.52	16.82	23.12
d_{32} (μm)	421.2	341.6	290.2	631.8	468	421.2	214	162	136
d_{32}/Δ	9.0	7.3	6.2	13.5	10	9.0	4.6	3.4	2.9

 TABLE 10.10. – Relevés des diamètres de Sauter, étude du We .

 FIGURE 10.21. – Évolution des diamètres de Sauter, étude du We .

10.4.5. Conclusion

Dans cette étude, l'objectif était d'illustrer et de comprendre l'influence du Weber sur le processus d'atomisation, indépendamment des autres nombres sans dimension.

L'étude décrite section 10.2 a mis en évidence une multitude de phénomènes liés aux couples initiaux $MFR-We$ mais n'a pas permis d'identifier clairement les effets découplés de chacun d'entre eux.

Pour réaliser cela, une étude paramétrique du Weber a été établie en déterminant les conditions initiales par la méthodologie de similitude section 6.4.

Les premières observations ont démontré que les processus d'atomisation d'une longueur d'onde isolée avaient des phases caractéristiques coïncidentes, indépendamment de la valeur du Weber initial. Les variations de ce nombre n'influencent que l'amplitude de surface atteinte. Ceci confirme la première hypothèse de découplage des phénomènes constatés section 10.2 et 10.3. Le Weber semble n'agir que sur les phénomènes producteurs de surface tandis que le rapport des flux de quantités de mouvement n'intervient que sur le temps caractéristique d'un tel processus.

Les évolutions des diamètres caractéristiques des gouttes, bien que non comparables à des valeurs expérimentales, montrent une dépendance du Weber cohérente avec les évolutions de ces derniers.

10.5. Conclusion des études réalisées en similitude par rapport aux expériences

Toutes les études réalisées dans ce chapitre ont permis d'étudier qualitativement et quantitativement les effets induits par les variations des nombres sans dimension sur le processus d'atomisation.

L'objectif de la première étude était de reproduire, en configuration simplifiée périodique, les variations présentes dans le processus d'atomisation par le changement des points de fonctionnements de Dejean [45]. Ces derniers sont démonstratifs d'un débit d'air entrant accru représenté par une augmentation de la vitesse gaz. Pour réaliser cela, une étude en similitude a été menée en conservant les nombres sans dimension les plus pertinents, notamment le MFR et le We .

Un premier résultat a mis en évidence l'influence du MFR sur le temps caractéristique relié au processus d'atomisation. D'autre part, les visualisations de l'interface ainsi que plusieurs indicateurs ont illustré des variations cohérentes avec cette prise en compte de l'augmentation de la vitesse gaz expérimentale (via les nombres sans dimension). Toutes les modifications observées sur les processus d'atomisation sont en accord avec les observations de Dejean [45] mais la résolution, trop grossière, ainsi que les simplifications de la configuration périodique, ne permettent que des comparaisons qualitatives.

Cette étude, en conservant ces nombres sans dimension, a reproduit une des limitations de ces dispositifs expérimentaux, à savoir, les multiples dépendances entre ces nombres. En effet, d'un point de vue expérimental, la variation d'un paramètre tel que la vitesse du gaz impacte celle de plusieurs nombres tels que le We et le MFR . Toutefois, ces dépendances ne permettent pas de statuer à propos de l'influence séparée de chacun d'entre eux. Pour résoudre cela de nouvelles analyses, complémentaires aux expériences, furent menées.

La deuxième étude s'articule autour des effets induits par le MFR seul, à We fixe. Une première catégorisation des effets induits par les variations de ce nombre est possible avec l'aide de la première étude, section 10.2. Les indicateurs ainsi que les visualisations employés illustrent la quasi-indépendance du MFR sur la magnitude des phénomènes producteurs de surface. Seul le temps caractéristique du processus d'atomisation est impacté par de tels changements. Bien que cette conclusion soit contre-intuitive par rapport aux observations expérimentales, plusieurs pistes peuvent l'expliquer et sont citées section 10.3.5.

La troisième étude se termine par l'analyse du We sur le processus d'atomisation, à MFR fixe. Cette dernière permet de valider les premières hypothèses de l'analyse de l'influence du MFR seul, à l'aide des études section 10.2 et 10.3. Le temps caractéristique d'un tel processus d'atomisation n'est pas influencé par le Weber, seule la production de surface l'est. En effet, la génération des gouttes ainsi que le diamètre de Sauter qui en découle sont modifiés par les variations de ce nombre. La comparaison qualitative avec les résultats de Dejean [45] montre une évolution du diamètre de Sautersimilaire. Ainsi, le Weber conditionne les caractéristiques du spray résultant, sous hypothèse de conservation de la représentativité des simulations.

Fort de cette première catégorisation des nombres sans dimension, l'étape suivante fut d'établir des corrélations comportementales afin de modéliser leurs influences respectives.

Exploitations des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine périodique

Ce chapitre présente, en deux étapes, l'exploitation des résultats des simulations d'atomisation de nappes dans un domaine périodique.

Tout d'abord, des corrélations comportementales ont été réalisées à partir des observations des simulations précédentes, notamment sur le temps caractéristique lié au processus d'atomisation ainsi que la magnitude de production de surface.

Par la suite, ceci a servi à établir une modélisation LES de l'atomisation en se basant sur les approches à aire interfaciale de Vallet [172], Lebas [99] et Chesnel [35]. En particulier, les fermetures des paramètres fondamentaux de ce modèle, notamment le temps de relaxation et le nombre de Weber à l'équilibre, sont proposées par une nouvelle approche phénoménologique. Cette dernière utilise la base de données générées par la détection et l'analyse des structures liquides produites durant le processus d'atomisation.

Sommaire

11.1. Corrélations comportementales	170
11.1.1. Temps caractéristique du processus d'atomisation	170
11.1.2. Intensité de surface produite et diamètres caractéristiques	171
11.1.3. Conclusion	173
11.2. Paramétrage du modèle d'atomisation LES	174
11.2.1. Réjection des structures générées par les conditions limites	174
11.2.1.1. Construction d'un volume seuil	175
11.2.2. Construction des Weber caractéristiques	175
11.2.2.1. Weber basé sur le nombre de gouttes	175
11.2.2.2. Weber basé sur le volume de gouttes	176
11.2.2.3. Weber basé sur le diamètre de Sauter	176
11.2.2.3.1. Hypothèses de modélisation	176
11.2.2.3.2. Définition et construction du Weber	177
11.2.3. Détermination du temps et Weber d'équilibre	178
11.2.3.1. Temps de retour à l'équilibre	179
11.2.3.2. Weber à l'équilibre	180
11.2.4. Conclusion	182
11.3. Conclusion sur l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine périodique	183

11.1. Corrélations comportementales

Les études en similitude ont mis en évidence les effets séparés de certains nombres sans dimension sur le processus d'atomisation. L'objectif de ce point d'étude est de valider ces observations en représentant ces diverses influences au moyen de corrélations.

Pour réaliser cela, une base de données est construite à partir des simulations d'atomisation de nappes en configuration périodique. Une partie de ces dernières ont été présentées dans le chapitre 10 tandis que celles restantes s'appuient sur les nombres sans dimension des expériences de Dejean [45], Table 6.2.

Les géométries et maillages de toutes ces simulations sont équivalents à ceux de l'étude du cas de référence, chapitre 8.

11.1.1. Temps caractéristique du processus d'atomisation

La première des corrélations a été employée dans les études en similitude, chapitre 10, afin de faire coïncider chacune des différentes phases de l'atomisation, indépendamment des nombres sans dimension employés. Cette dernière utilise le rapport des flux de quantité de mouvements et celui des densités pour établir une nouvelle échelle temporelle.

L'évolution de la surface liquide illustre l'importance de cette adimensionnalisation temporelle et permet d'illustrer les étapes qui ont mené à la construction de ce temps caractéristique.

Les évolutions des surfaces liquides possèdent un temps caractéristique dépendant des nombres sans dimension, Figure 11.1a. Des écarts se manifestent dès le développement des grandes échelles et impactent l'ensemble des processus d'atomisation. Cependant, une première classification se distingue au-travers du développement des grandes échelles. Ces dernières surviennent plus rapidement lorsque le rapport des flux de quantité de mouvements ou le rapport des densités augmente.

Pour cette raison, une première adimensionnalisation a été effectuée en fonction d'un temps convectif relié à la longueur d'onde initiale. Cette formulation s'exprime en fonction des paramètres constants, U_l et λ_x , ainsi que des nombres sans dimension, MFR et $\hat{\rho}$, équations (11.1) et (11.2).

$$t^* = t \frac{U_l}{\lambda_x} \quad (11.1)$$

$$t^* = t \frac{U_l}{\lambda_x} \sqrt{\frac{MFR}{\hat{\rho}}} \quad (11.2)$$

De cette manière, les retards induits par les rapports des flux de quantité de mouvements s'estompent. Toutefois, des décalages restent présents entre les simulations possédant des rapports de densités différents, Figure 11.1b.

Afin de combler ce retard persistant, le rapport des densités est ré-employé, $\hat{\rho}^C$, équation (11.3). Cette dernière formulation permet de faire coïncider chacune des phases de l'atomisation, indépendamment des nombres sans dimension, Figure 11.1c.

$$t^* = t \frac{U_l}{\lambda_x} \sqrt{\frac{MFR}{\hat{\rho}}} \hat{\rho}^C \quad \text{avec} \quad C = -0.4 \quad (11.3)$$

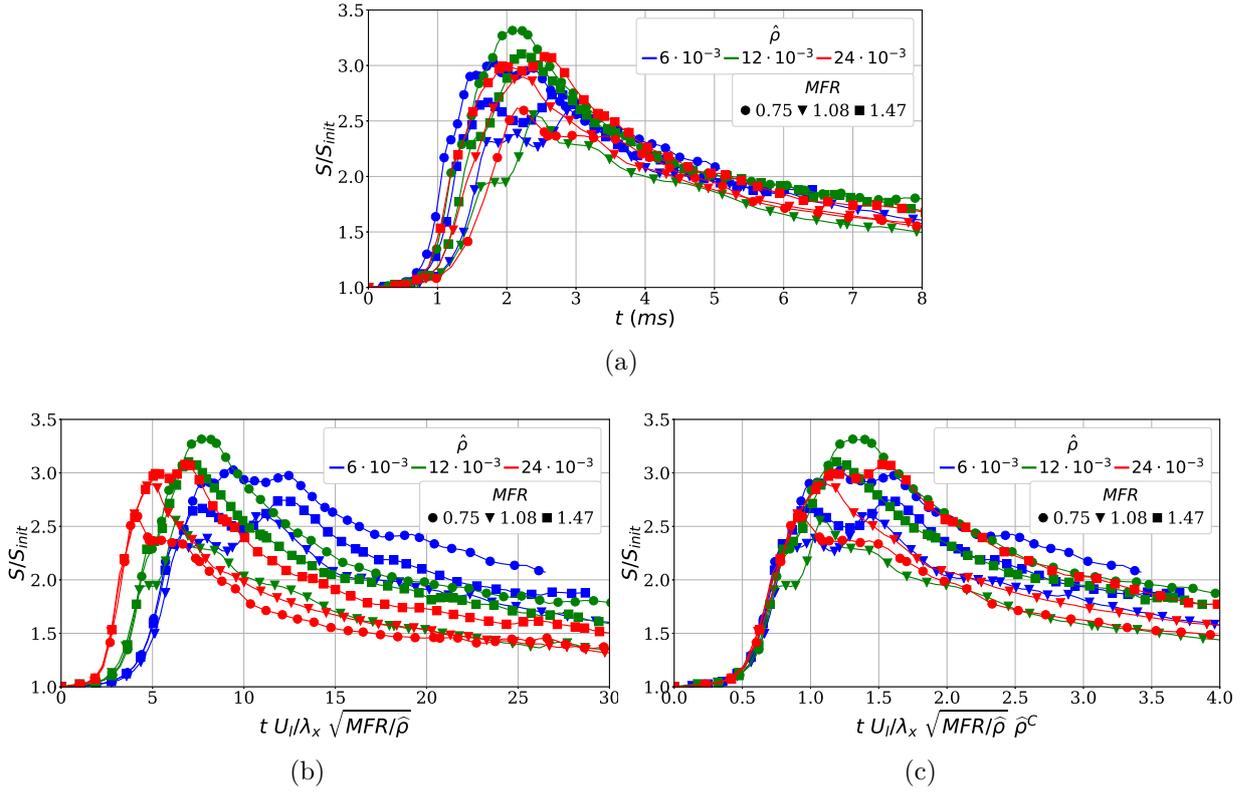


FIGURE 11.1. – Évolution des surfaces liquides, corrélations comportementales.

11.1.2. Intensité de surface produite et diamètres caractéristiques

Plusieurs observations de l'étude en similitude présentent le Weber comme le nombre sans dimension dirigeant la production de surface, section 10.4.

L'analyse et la représentation de ce paramètre sont délicates car les conditions limites peuvent altérer la mesure de la surface et invalider une potentielle modélisation au-travers des coalescences forcées. Pour cette raison, les points de fonctionnement employés dans l'étude de son influence, section 10.4, sont ré-employés et résumés dans la Table 11.1 suivante :

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
			23.12		
$1.2 \cdot 10^{-2}$	598.8	1581.1	16.82	$1.79 \cdot 10^{-2}$	0.75
			11.52		

TABLE 11.1. – Nombres sans dimension utilisés, corrélation du Weber.

Cette corrélation comportementale s'appuie sur le temps caractéristique t^* ainsi que sur l'évolution de la surface liquide. Cette dernière permet de visualiser les excédents de surface devant être pris en compte dans chacune des phases de l'atomisation, Figure 11.2a.

Les excédents de surfaces produits sont directement liées à la valeur du Weber puisque c'est le seul nombre sans dimension à être variable. Pour cette raison, la corrélation suivante est proposée :

$$S^* = SWe^{-D} \quad \text{avec} \quad D = 0.35 \quad (11.4)$$

Cette nouvelle corrélation rassemble les courbes, durant la majeure partie du processus d'atomisation, en une seule Figure 11.2b. Des différences subsistent au début des simulations, dues aux initialisations des nappes, et proches des maximums de surface. En effet, les comportements du liquide durant cette phase sont difficiles à analyser avec des topologies très perturbées.

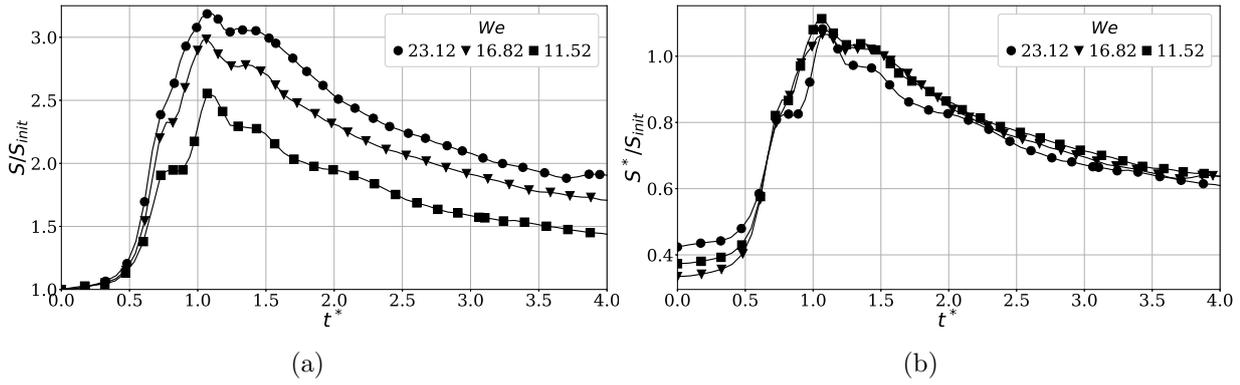


FIGURE 11.2. – Évolution de la surface liquide, corrélation du We .

Ces excédents de surfaces se répercutent sur les diamètres caractéristiques, c'est pourquoi, cette corrélation a été transposée afin de représenter leurs propres évolutions.

$$d_{32}^* = d_{32} We^D \quad (11.5)$$

Les fortes variations du diamètre de Sauter illustrent l'influence du Weber sur la génération du spray. Sa corrélation, équation (11.5), permet de faire collapser ses différentes évolutions et ainsi de s'affranchir de l'influence de ce nombre, Figure 11.3b. Ceci reste vrai jusqu'à ce que les effets induits par les conditions limites se manifestent, pour $t^* \geq t_{cmp}^*$ avec $t_{cmp}^* = 2.5$.

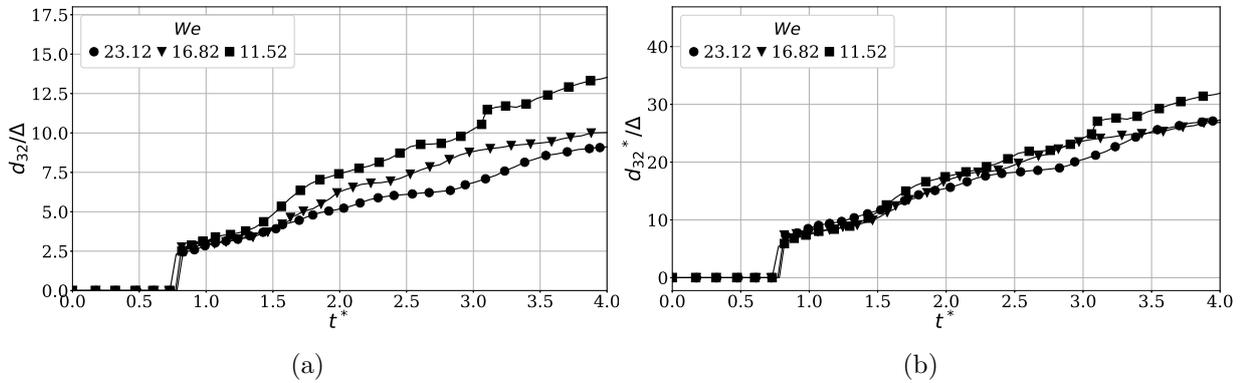


FIGURE 11.3. – Diamètre de Sauter, corrélation du We .

Une comparaison des diamètre de Sauter les plus pertinents ($d_{32}^*(t_{cmp}^*)$) avec ceux de Dejean [45] a été réalisée, Figure 11.4. La corrélation du diamètre de Sauter en fonction du Weber (d_{32corr}) est ajoutée afin d'illustrer que son évolution correspond, qualitativement, aux mesures expérimentales, équation (11.6).

$$d_{32}^*(t_{cmp}^*) = A = 936 \quad d_{32corr} = \frac{d_{32}^*(t_{cmp}^*)}{We^D} \quad (11.6)$$

Bien qu'entachée d'erreurs, cette corrélation fut transposée sur les mesures expérimentales et démontre une évolution en accord avec l'expérience, équation (11.7) Figure 11.4.

$$d_{32corr} = \frac{d_{32}^*(t_{cmp}^*)}{We^D} + C \quad \text{avec} \quad C = -190 \quad (11.7)$$

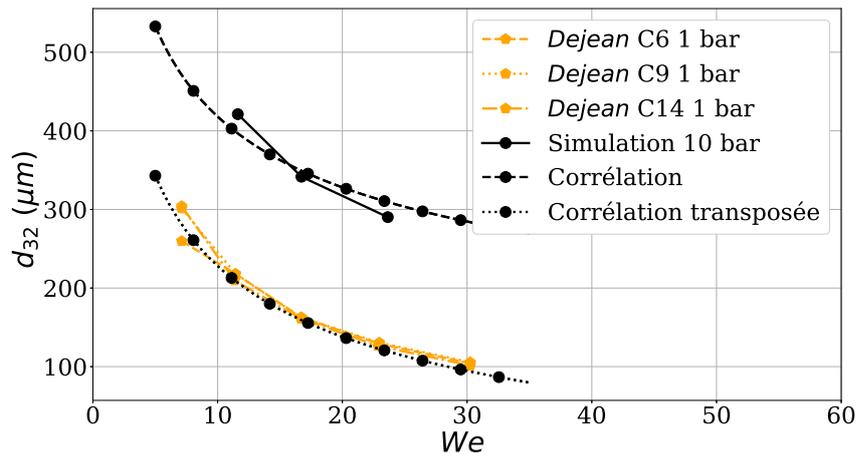


FIGURE 11.4. – Diamètres de Sauter issus des simulations, des expériences et de corrélation.

11.1.3. Conclusion

L'objectif de cette étude était d'établir des corrélations comportementales destinées à représenter les diverses influences des nombres sans dimension sur le processus d'atomisation.

La première de ces corrélations s'intéresse au temps caractéristique d'un tel processus et s'appuie sur le rapport des flux de quantité de mouvements et sur le rapport des densités pour le construire. En effet, dans cette configuration périodique simplifiée, seules ces deux quantités influencent le déroulement de l'atomisation. De plus, l'utilisation de ce nouveau temps caractéristique permet de comparer chacune des phases des processus d'atomisation de manière cohérente et ce quels que soient les nombres sans dimension employés.

Le point suivant établit un lien direct entre le Weber et l'intensité de la production de surface. La détermination de cette corrélation s'appuie sur une base de simulations réduites dont l'avancement est moins sujet aux biais induits par les conditions limites. Les différentes évolutions de surfaces ont permis d'établir une formulation dépendante du Weber qui les fait collapser. À partir de cela, s'en sont suivi de nouvelles formulations pour le diamètre de Sauter qui, découlant des variations de surface, emploie la même construction.

D'autre part, les mesures issues des simulations sont cohérentes avec celles de Dejean [45]. La loi comportementale permettant de décrire les évolutions du diamètre de Sauter en fonction du Weber s'y applique correctement et se transpose judicieusement aux mesures expérimentales.

Ces différentes corrélations ont permis de représenter divers phénomènes présents au sein d'un processus d'atomisation à l'aide des nombres sans dimension. L'étape suivante consiste à paramétrer un modèle d'atomisation en s'inspirant de ces nouvelles lois comportementales.

11.2. Paramétrage du modèle d'atomisation LES

Le changement de résolution d'une DNS à une LES implique un élargissement des mailles, Δ , et entraîne une perte d'informations à propos de la topologie interne de l'interface. Ce manque d'informations nécessite de prendre en compte les échelles liquides sous-mailles afin de prédire la granulométrie du brouillard généré.

Une piste pour reconstruire cette information consiste à définir une quantité appelée densité d'interface. Cette dernière permet de décrire de façon statistique la dispersion d'un volume liquide dans un volume de contrôle donné. De plus, une équation de transport supplémentaire décrivant l'évolution de la densité d'interface peut être résolue, en analogie aux grandeurs typiques des approches turbulentes (énergie cinétique turbulente, taux de dissipation).

Une fois cette équation de transport implémentée, la densité d'aire interfaciale peut être mise à profit pour obtenir un diamètre caractéristique local de la phase dispersée. Ce dernier s'obtient via le rapport du volume de la maille sur l'aire interfaciale à l'intérieur. Ce diamètre s'apparente à un diamètre de Sauter, issu du ratio du deuxième et troisième moment de la densité de probabilité en taille locale du spray.

L'équation décrivant l'évolution de l'aire interfaciale Σ est une équation de transport-diffusion avec des termes sources, ou puits, qui doivent être dimensionnés. Plus précisément, l'information filtrée $\overline{\Sigma}'$ est modélisée par une équation de transport décrite section 3.3.4, équation (3.63). Le terme source, régulant sa croissance, s'inspire du modèle de Reitz and Diwakar [149] qui utilise un temps de mise à l'équilibre des structures τ_{eq} , équation (3.65), ainsi qu'une valeur de densité d'interface associée à cet instant $\overline{\Sigma}_{eq}$, équation (3.69). Ce temps caractéristique représente la durée nécessaire au liquide pour atteindre un état d'équilibre, sous la forme d'un spray, dans lequel ses caractéristiques n'évoluent plus ou peu. De plus, la densité d'interface à l'équilibre s'apparente à un diamètre caractéristique local de cette phase dispersée à cet instant.

Chesnel [35] fait l'hypothèse d'une décomposition de $\overline{\Sigma}_{eq}$ en une contribution résolue $\overline{\Sigma}_{eq\ min}$ et une contribution sous maille $\overline{\Sigma}'_{eq}$ à modéliser, équation (3.66). La première est accessible de plusieurs manières, soit par la mesure de la surface au sein de la maille en première approximation, soit grâce à la modélisation associée au volume interne que Chesnel [35] y associe, équation (3.62). La dernière contribution est définie grâce à l'hypothèse d'un Weber d'équilibre unitaire We_{eq} , illustrant un équilibre local entre les forces dynamiques et les forces surfaciques, équation (3.67).

Dans cette étude, une nouvelle approche phénoménologique a été choisie afin de déterminer le temps caractéristique de mise à l'équilibre τ_{eq} ainsi que la valeur de densité d'interface et le Weber qui y sont associés $\overline{\Sigma}_{eq}$, We_{eq} . Ces investigations s'appuient sur une base de données réduite mais pertinente décrite à partir de l'étude en similitude précédente, chapitre 10.

En premier lieu, une opération de réjection a été réalisée au préalable sur cette base de données pour limiter l'influence des conditions limites, au-travers des coalescences forcées, lors de la détermination des paramètres du modèle d'atomisation. La seconde étape fut de construire plusieurs définitions de Weber en fonction de l'importance des caractéristiques du spray. Cela permet d'étayer les choix possibles du Weber d'équilibre en fonction de la représentativité du spray voulu. Enfin, des propositions de temps et de Weber d'équilibre furent faites à partir de cette base de données, en appliquant les opérations précédentes.

11.2.1. Réjection des structures générées par les conditions limites

Toutes les simulations périodiques ont permis de bâtir une base de données contenant, pour chaque instant d'analyse, un ensemble de structures détectées avec ses caractéristiques instantanées : volume, surface, positions, vitesses etc. Celles générées par les conditions limites doivent être rejetées de cette base de données pour limiter leurs impacts sur l'analyse générale du processus d'atomisation.

La construction de cette méthodologie de réjection est présentée, section 11.2.1.1, tandis que son application sur les simulations issues de l'étude en similitude, chapitre 10, est développée plus en détail dans l'annexe B.1.

11.2.1.1. Construction d'un volume seuil

L'enlèvement d'une structure de la base de données s'appuie sur un volume seuil défini à partir du domaine géométrique, des longueurs d'ondes initiales et du volume de la nappe liquide. Par ailleurs, les visualisations de l'interface de la nappe démontrent une division longitudinale supplémentaire, expliquant le paramètre C .

$$V_{seuil} = V_{nappe} \frac{1}{C} \frac{\lambda_x}{L_x} \frac{\lambda_z}{L_z} \quad \text{avec } C = 3 \quad (11.8)$$

Une approximation sphérique est réalisée à partir de ce volume seuil, V_{seuil} , pour déterminer un diamètre limite de goutte équivalent, d_{seuil} .

$$d_{seuil} = \left(\frac{6V_{seuil}}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (11.9)$$

Toutes les études réalisées au sein des chapitres 8 et 10 utilisent un domaine géométrique ainsi qu'une résolution identique, Tables 8.5 et 8.6. Pour cette raison, le diamètre seuil est établi à $d_{seuil}/\Delta = 20$.

11.2.2. Construction des Weber caractéristiques

La détermination du Weber d'équilibre, We_{eq} équation (3.67), est essentielle à la fermeture du terme source représentant la contribution sous maille de la densité d'interface, $\overline{\Sigma}'_{eq}$. Afin d'estimer ce Weber, une approche phénoménologique est privilégiée, contrairement aux travaux de Chesnel [35] qui supposent une valeur unitaire.

Afin d'estimer cette quantité à l'équilibre, plusieurs définitions de Weber furent construites en utilisant des quantités mesurées différemment. Bien que ces versions de Weber soient différentes, toutes s'appuient sur la même définition initiale décrite équation (11.10). En effet, la base de données construite par l'étude des simulations périodiques permet d'avoir accès, à chaque instant d'analyse, aux informations de chacune des gouttes détectées. Ainsi, grâce à cette dernière, le Weber d'une goutte i à l'instant t est défini de la manière suivante :

$$We_{gt}(i, t) = \frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt\ cg}(i, t)\|^2 d_{gt}(i, t)}{\sigma} \quad (11.10)$$

Avec \vec{U}_{ref} la vitesse de référence, qui, dans cette étude périodique, est associée à la valeur initiale U_g . Ce choix simplifie l'expression du Weber d'une goutte avec une vitesse gaz qui n'est pas estimée à partir d'une multitude d'hypothèses : couches limites, domaine d'influence etc. Le terme $\vec{U}_{gt\ cg}$ désigne la vitesse d'une goutte relevée en son centre de gravité, d_{gt} son diamètre, ρ_g la densité du gaz et σ la tension de surface du liquide.

Avec l'aide de l'équation (11.10), plusieurs définitions de Weber ont été établies en fonction des caractéristiques du spray voulant être représentées. Ces dernières sont listées ci-dessous :

- Weber moyenné sur le nombre de gouttes du spray, $\langle We_{gt} \rangle_n$.
- Weber pondéré sur le volume de gouttes du spray, $\langle We_{gt} \rangle_v$.
- Weber moyenné sur le diamètre de Sauter du spray, $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$.

11.2.2.1. Weber basé sur le nombre de gouttes

Le Weber d'équilibre est une mesure représentative du cisaillement de l'ensemble d'un spray. Pour cette raison, la première définition de Weber s'appuie sur une moyenne arithmétique du Weber de chacune des gouttes, équation (11.11).

$$\langle We_{gt} \rangle_n(t) = \frac{1}{n_{gt}(t)} \sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} \left(\frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt\ cg}(i, t)\|^2 d_{gt}(i, t)}{\sigma} \right) \quad (11.11)$$

Le sigle $\langle \cdot \rangle$ désigne l'opération moyenne et $n_{gt}(t)$ le nombre de gouttes détectées à l'instant t . Toutefois, dans cette configuration périodique les sprays générés sont fortement polydispersés, c'est pourquoi une nouvelle définition dépendante du volume a été construite.

11.2.2.2. Weber basé sur le volume de gouttes

Toutes les études précédentes ont démontré que les sprays générés par les processus d'atomisation sont polydispersés. Les nuages de gouttes obtenus sont composés d'une multitude de petites gouttes dont le volume cumulé est négligeable devant celui des quelques larges gouttes restantes. Cette distribution inégale du volume dirige cette deuxième définition en pondérant les valeurs du Weber des gouttes par leur volume respectif, équation (11.12).

$$\langle We_{gt} \rangle_v(t) = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} V_{gt}(i, t)} \sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} \left(\frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt\ cg}(i, t)\|^2 d_{gt}(i, t)}{\sigma} V_{gt}(i, t) \right) \quad (11.12)$$

Sachant que le volume d'une goutte i à l'instant t est noté $V_{gt}(i, t)$.

En raison de la proximité de la définition de la densité d'interface et de diamètre d_{32} , ce dernier peut être naturellement considéré comme une longueur caractéristique possible pour le calcul du Weber d'équilibre. Pour cela, la prochaine définition de Weber s'appuie sur une modélisation du spray par son diamètre de Sauter.

11.2.2.3. Weber basé sur le diamètre de Sauter

La dernière définition de Weber s'appuie sur une modélisation du spray simulé via son diamètre de Sauter. Afin de réaliser cela, ce diamètre caractéristique est calculé à chaque instant du processus d'atomisation et employé tel un diamètre de goutte caractéristique, Figure 11.5.

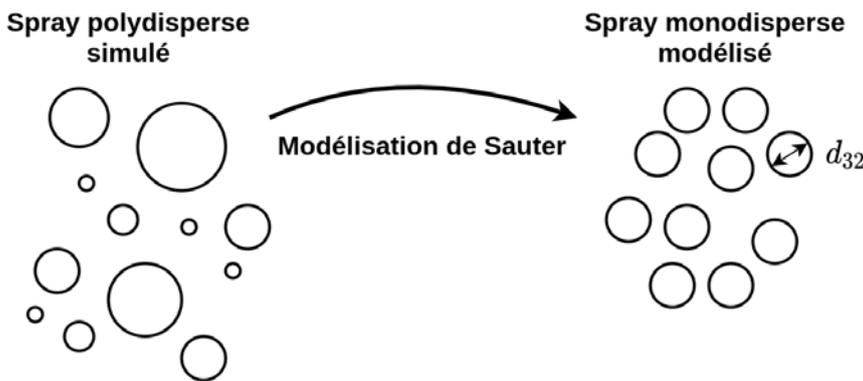


FIGURE 11.5. – Modélisation d'un nuage de gouttes polydispersés par un spray monodisperse équivalent ayant comme diamètre celui de Sauter.

11.2.2.3.1. Hypothèses de modélisation

Pour réaliser cette modélisation, plusieurs hypothèses ont été effectuées dont la première concerne l'équivalence des diamètres de Sauter entre le spray simulé et sa modélisation, équation (11.13).

$$d_{32}(t) = 6 \frac{\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} V_{gt}(i, t)}{\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} S_{gt}(i, t)} = 6 \frac{\sum_{i=1}^{n_{gt \text{ model}}(t)} V_{gt \text{ model}}(i, t)}{\sum_{i=1}^{n_{gt \text{ model}}(t)} S_{gt \text{ model}}(i, t)} \quad (11.13)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Spray simulé}}$
 $\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Spray modélisé}}$

Par la suite, toutes les grandeurs reliées à la modélisation sont notées au moyen de l'indice $(\cdot)_{\text{model}}$. Ainsi, le nombre de gouttes dans cette modélisation est noté $n_{gt \text{ model}}$ alors que le volume et la surface d'une de ces gouttes modélisées i à l'instant t sont notés $V_{gt \text{ model}}(i, t)$ et $S_{gt \text{ model}}(i, t)$.

L'hypothèse suivante concerne la conservation du volume des gouttes entre le spray simulé et sa modélisation, équation (11.14).

$$\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} V_{gt}(i, t) = V_{gt \text{ tot}}(t) = \sum_{i=1}^{n_{gt \text{ model}}(t)} V_{gt \text{ model}}(i, t) \quad (11.14)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Spray simulé}}$
 $\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Spray modélisé}}$

Grâce à ces deux dernières équivalences, équations (11.13) et (11.14), le nombre de gouttes de cette modélisation est accessible par l'équation (11.15).

$$n_{gt \text{ model}}(t) = 6 \frac{V_{gt \text{ tot}}(t)}{\pi d_{32}(t)^3} \quad (11.15)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Spray modélisé}}$

11.2.2.3.2. Définition et construction du Weber

La construction de cette nouvelle définition de Weber repose sur la première, équation (11.11), qui est appliquée sur le spray équivalent modélisé, équation (11.16).

$$We_{gt}(i, t) = \frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \text{ cg}}(i, t)\|^2 d_{gt}(i, t)}{\sigma} \quad \text{avec} \quad \vec{U}_{gt \text{ cg}} = \vec{U}_{gt \text{ cg, model}} \quad (11.16)$$

$d_{gt} = d_{32}$

Toutefois, la vitesse au centre de gravité des gouttes modélisées, $\vec{U}_{gt \text{ cg, model}}$, n'est pas connue. Afin de l'estimer, une conservation de l'énergie cinétique entre ces deux représentations est supposée. Ainsi la somme des énergies cinétiques de chacune des gouttes est équivalente dans les deux représentations, équation (11.17).

$$\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} \rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \text{ cg}}(i, t)\|^2 V_{gt}(i, t) = \sum_{i=1}^{n_{gt \text{ model}}(t)} \rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \text{ cg, model}}(i, t)\|^2 V_{gt \text{ model}}(i, t) \quad (11.17)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Spray simulé}}$
 $\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Spray modélisé}}$

Grâce aux hypothèses précédentes, équations (11.13) (11.14) et (11.15), des simplifications de l'équation (11.17) sont possibles. En effet, le spray modélisé est monodisperse avec un diamètre constant d_{32} . Ceci implique un volume ainsi qu'un vecteur vitesse identique pour chaque goutte, $V_{gt \text{ model}}$ et $\vec{U}_{gt \text{ cg, model}}$. Tout ceci permet de simplifier l'expression précédente :

$$\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} \rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \text{ cg}}(i, t)\|^2 V_{gt}(i, t) = \sum_{i=1}^{n_{gt \text{ model}}(t)} \rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \text{ cg, model}}(i, t)\|^2 V_{gt \text{ model}}(i, t)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Spray simulé}}$

$$\begin{aligned}
 &= n_{gt \ model}(t) \rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg, \ model}(t)\|^2 V_{gt \ model}(t) \\
 &= \underbrace{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg, \ model}(t)\|^2 V_{gt \ tot}(t)}_{\text{Spray modélisé}} \quad (11.18)
 \end{aligned}$$

De cette manière, pour chaque instant t d'analyse, la composante dynamique, dépendante de $\vec{U}_{gt \ cg, \ model}$, devient accessible. Cette dernière ne dépend que des propriétés du spray de la simulation périodique, à l'instant t correspondant, équation (11.19).

$$\|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg, \ model}(t)\|^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg}(i, t)\|^2 V_{gt}(i, t)}{V_{gt \ tot}(t)} \quad (11.19)$$

Grâce à cette expression, l'obtention du Weber d'une des gouttes de cette modélisation est désormais possible, équation (11.16).

Le calcul d'un Weber d'équilibre s'effectue sur un ensemble de gouttes, c'est pourquoi, les opérateurs moyens basés sur le nombre et le volume de goutte sont ré-employés sur cette modélisation du spray, $\langle We_{gt} \rangle_n$ et $\langle We_{gt} \rangle_v$.

La première moyenne se base sur le nombre de gouttes de cette modélisation, équation (11.20). Toutefois, le caractère monodisperse du spray ainsi que l'unicité des diamètres et des contributions dynamiques, simplifient cette expression :

$$\begin{aligned}
 \langle We_{gt} \rangle_n(t) &= \frac{1}{n_{gt \ model}(t)} \sum_{i=1}^{n_{gt \ model}(t)} \left(\frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg, \ model}(i, t)\|^2 d_{32}(i, t)}{\sigma} \right) \\
 &= \frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg, \ model}(t)\|^2 d_{32}(t)}{\sigma} \quad (11.20)
 \end{aligned}$$

La seconde moyenne pondère cette opération au moyen du volume des gouttes de cette modélisation, équation (11.21). Néanmoins, les mêmes hypothèses s'appliquent à cette expression et la simplifient de la même manière :

$$\begin{aligned}
 \langle We_{gt} \rangle_v(t) &= \frac{1}{V_{gt \ tot}(t)} \sum_{i=1}^{n_{gt \ model}(t)} \left(\frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg, \ model}(i, t)\|^2 d_{32}(i, t)}{\sigma} V_{gt \ model}(i, t) \right) \\
 &= \frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg, \ model}(t)\|^2 d_{32}(t)}{\sigma} \quad (11.21)
 \end{aligned}$$

Ainsi, les hypothèses qui découlent de cette modélisation font converger vers la même valeur, les moyennes de Weber employées précédemment, $\langle We_{gt} \rangle_n$ et $\langle We_{gt} \rangle_v$. Le calcul du Weber d'une goutte, de cette modélisation, équivaut à réaliser une moyenne arithmétique ou volumique sur l'ensemble du spray modélisé. Pour cette raison, la définition du Weber associée à cette modélisation est notée $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$, équation (11.22).

$$\begin{aligned}
 \langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}(t) &= \langle We_{gt} \rangle_n(t) = \langle We_{gt} \rangle_v(t) \\
 &= \frac{\rho_g \|\vec{U}_{ref} - \vec{U}_{gt \ cg, \ model}(t)\|^2 d_{32}(t)}{\sigma} \quad (11.22)
 \end{aligned}$$

11.2.3. Détermination du temps et Weber d'équilibre

Le temps d'équilibre du modèle d'atomisation de Chesnel et al. [36] est associé, dans cette approche phénoménologique, à la durée nécessaire aux structures liquides pour atteindre un état stable, n'ayant plus de changement topologique. D'autre part, le Weber d'équilibre doit être repré-

sentatif de l'état énergétique du spray à cet instant d'équilibre. Grâce à ce dernier, la contribution de densité d'interface sous maille peut être prédite dans des simulations aux grandes échelles.

Pour toutes ces raisons, la détermination de ces deux quantités est primordiale pour le paramétrage d'un tel modèle LES d'atomisation.

La détermination de ces deux paramètres est effectuée à partir des simulations réalisées dans les études précédentes en similitudes, sections 10.4 et 10.3.

11.2.3.1. Temps de retour à l'équilibre

Le temps d'équilibre, τ_{eq} , représente la durée nécessaire pour stabiliser un spray en formation. Ce temps caractéristique est d'autant plus difficile à déterminer dans une configuration périodique puisque les conditions limites peuvent altérer les caractéristiques du spray en favorisant des coalescences liquides. Afin de limiter cet effet préjudiciable, l'opération de réjection des plus larges structures (gouttes incluses) décrite section 11.2.1 est appliquée sur l'ensemble des simulations employées dans cette étude.

L'estimation du temps de mise à l'équilibre des gouttes est obtenue en s'appuyant sur l'observation du processus d'atomisation. Dans cette approche phénoménologique, le temps caractéristique doit être situé à proximité du maximum de gouttes générées, $\tau_{eq}^* \approx 2.5$, Figure 11.6a. Avant celui-ci, le processus d'atomisation est en cours de déploiement tandis qu'au-delà les conditions limites périodiques commencent à altérer les propriétés du spray, notamment en réduisant le nombre de gouttes.

Les structures générées par les coalescences forcées apparaissent majoritairement en fin d'atomisation, Figure B.1, à la suite du maximum de gouttes détectées Figure 11.6b. Cela signifie que la pertinence, la représentativité, des simulations par rapport aux expériences commence à se dégrader au-delà de cet instant. Ceci définit donc un majorant pour l'estimation du temps de mise à l'équilibre, $\tau_{eq}^* \leq 3.0$.

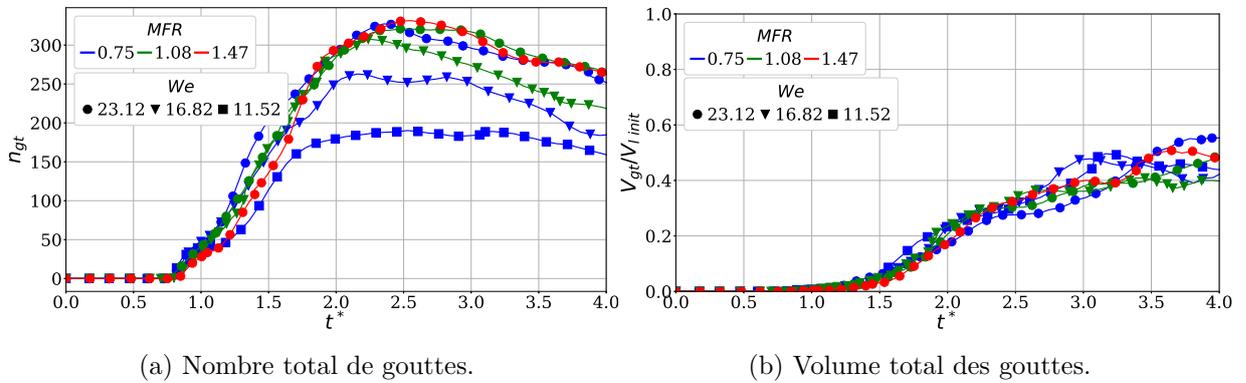


FIGURE 11.6. – Indicateurs globaux après l'opération de réjection, temps d'équilibre.

Ces deux considérations restreignent la plage de validité de ce temps d'équilibre. Son estimation est un compromis entre l'avancement du processus d'atomisation et sa représentativité par rapport à l'expérience.

$$\begin{aligned} \tau_{eq}^* &= B & \text{avec } B &= 2.5 \\ \tau_{eq} &= B \frac{\lambda_x}{U_l} \sqrt{\frac{\hat{\rho}}{MFR} \hat{\rho}^{-C}} & \text{avec } C &= -0.4 \end{aligned} \quad (11.23)$$

Les valeurs dimensionnelles dépendantes du point de fonctionnement sont listées Table 11.2.

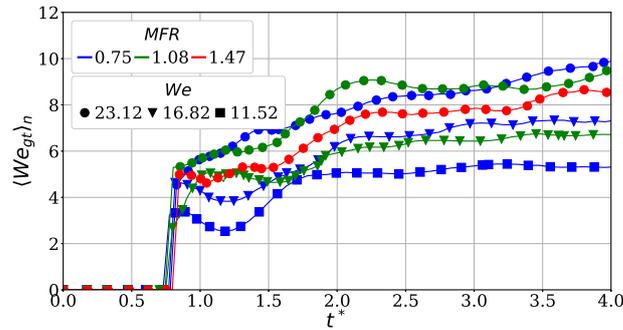
MFR	0.75	1.08	1.47
τ_{eq} (ms)	5.6	4.8	4.0

TABLE 11.2. – Recueil des temps d'équilibres.

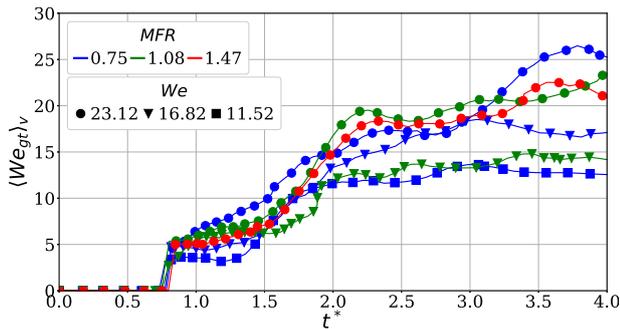
11.2.3.2. Weber à l'équilibre

L'obtention du temps de mise à l'équilibre facilite la détermination du Weber qui y est associé. En effet, dans cette approche phénoménologique, ce paramètre représente l'état dynamique du spray par rapport à son énergie de surface, à cet instant d'équilibre.

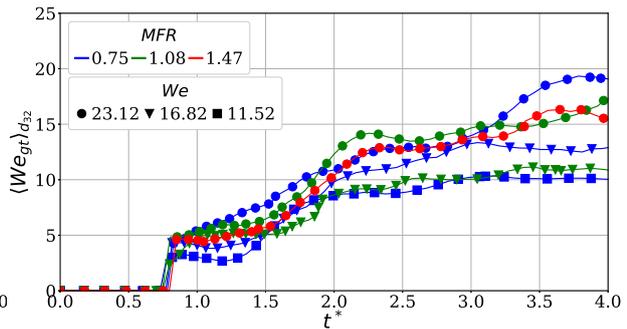
Toutes les définitions de Weber établies dans la section 11.2.2, à savoir $\langle We_{gt} \rangle_n$, $\langle We_{gt} \rangle_v$ et $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$ sont employées sur la même base de données que celle employée pour l'estimation du temps d'équilibre, Figure 11.7. L'opération de réjection des plus volumineuses structures y est appliquée pour limiter les biais induits par les conditions limites. Les modifications que cette opération entraîne sur les Weber $\langle We_{gt} \rangle_n$, $\langle We_{gt} \rangle_v$ et $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$ sont détaillées dans l'annexe B.2.



(a) $\langle We_{gt} \rangle_n$.



(b) $\langle We_{gt} \rangle_v$.



(c) $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$.

FIGURE 11.7. – Évolution des Weber après l'opération de réjection.

Toutes ces définitions et les mesures à l'équilibre qui y sont associées possèdent des valeurs au-dessus de l'unité, ce qui est opposé au postulat de Chesnel [35]. Cela signifie qu'en moyenne, un spray de gouttes peut atteindre un état d'équilibre en ayant une énergie cinétique supérieure à son énergie de surface.

Les évolutions analogues des diverses définitions employées ainsi que leurs catégorisations dépendantes du Weber initial, permettent d'établir des corrélations comportementales, équation (11.24), qui s'inspirent de celles décrites section 11.1.2.

$$\begin{aligned}
 \langle We_{gt} \rangle_n^* &= \langle We_{gt} \rangle_n / We^{1-D} \\
 \langle We_{gt} \rangle_v^* &= \langle We_{gt} \rangle_v / We^{1-D} \quad \text{avec } D = 0.35 \\
 \langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}^* &= \langle We_{gt} \rangle_{d_{32}} / We^{1-D}
 \end{aligned}
 \tag{11.24}$$

Cette normalisation permet d'atténuer l'influence du Weber initial et de rassembler les évolutions liées aux différentes simulations, Figure 11.8.

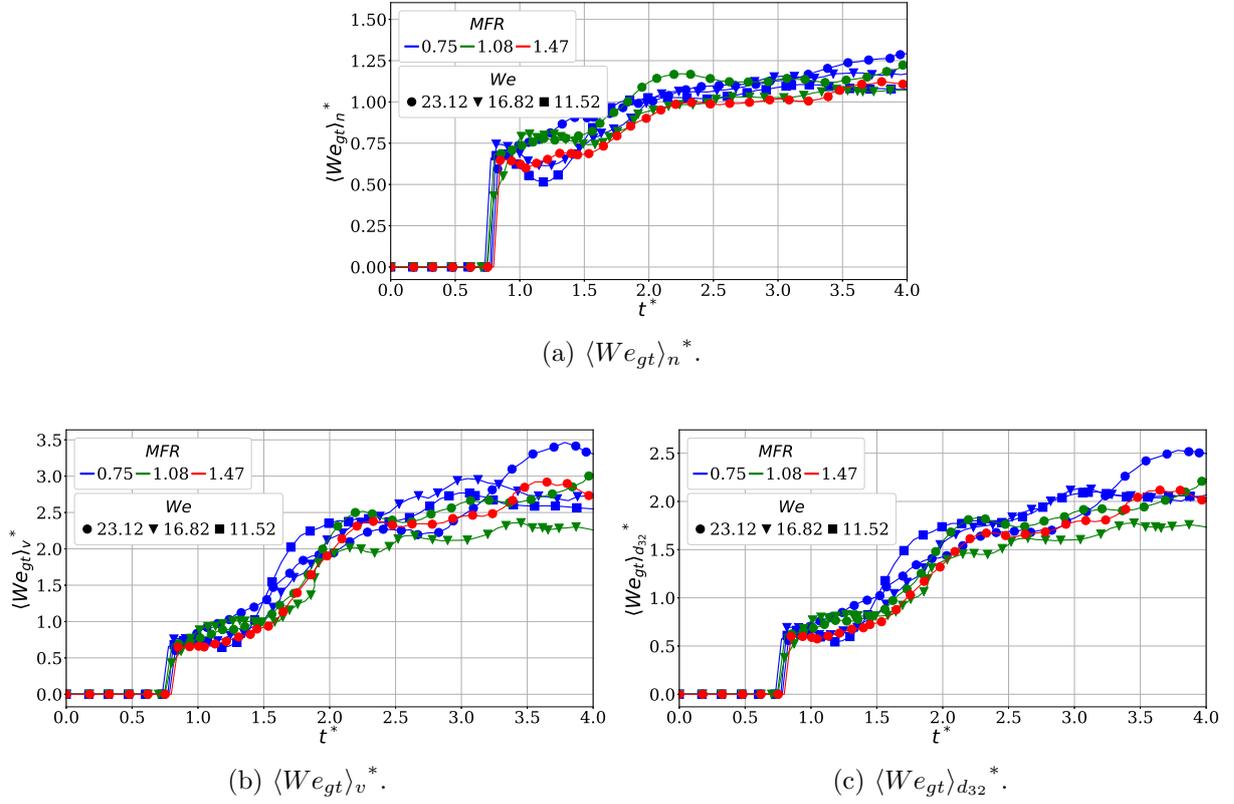


FIGURE 11.8. – Évolution des Weber d'équilibre normalisés, pour le relevé à l'équilibre.

Ces corrélations facilitent l'obtention du Weber d'équilibre puisque les évolutions se rassemblent dans des intervalles de variations réduites. De cette manière, le Weber d'équilibre n'est plus qu'une constante relevé au temps d'équilibre, $\tau_{eq}^* = 2.5$, dont la valeur diffère entre les définitions. Les valeurs de cette constante, notée E, sont résumées Table 11.3.

	$\langle We_{gt} \rangle_n^*(\tau_{eq}^*)$	$\langle We_{gt} \rangle_v^*(\tau_{eq}^*)$	$\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}^*(\tau_{eq}^*)$
E	1.1	2.4	1.75

TABLE 11.3. – Valeurs des Weber d'équilibres normalisés.

En inversant ces corrélations les expressions des Weber d'équilibres sont résumées équation (11.25).

$$\begin{aligned}
 \langle We_{gt} \rangle_n(\tau_{eq}^*) &= EWe^{1-D} \\
 \langle We_{gt} \rangle_v(\tau_{eq}^*) &= EWe^{1-D} \\
 \langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}(\tau_{eq}^*) &= EWe^{1-D}
 \end{aligned}
 \tag{11.25}$$

Ces formulations relient donc la valeur du Weber d'équilibre à celle du nombre sans dimension calculé à partir des conditions initiales. Les valeurs d'équilibres associées aux points de fonctionnement étudiés sont résumées ci-dessous Table 11.4.

We	$\langle We_{gt} \rangle_n$	$\langle We_{gt} \rangle_v$	$\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$
11.52	5.39	11.75	8.57
16.82	6.89	15.03	10.96
23.12	8.47	18.48	13.48

TABLE 11.4. – Valeurs des Weber d'équilibres en fonction des conditions initiales.

11.2.4. Conclusion

L'objectif de ce point d'étude était de déterminer, au moyen d'une approche phénoménologique, les paramètres du modèle d'atomisation LES de Chesnel [35]. Ces derniers sont le temps de relaxation des gouttes jusqu'à l'équilibre ainsi que le Weber qui y est associé.

Tout d'abord, une opération de réjection des gouttes a été réalisée afin de limiter les biais induits par les conditions limites au-travers des coalescences forcées. Pour réaliser cela, un volume ainsi qu'un diamètre seuil sont estimés à partir de paramètres géométriques ainsi que des observations de la fragmentation de la nappe. Au dessus de ce diamètre, les gouttes détectées ne sont plus prises en compte dans les analyses.

Ensuite, plusieurs définitions de Weber ont été construites afin d'illustrer l'état du spray suivant les considérations voulues. Ces définitions ont pour but d'être les plus représentatives du spray tout en étant adaptées à un calcul raffiné de DNS et un calcul de LES.

Enfin, la dernière partie se concentre sur la détermination des deux paramètres du modèle d'atomisation, le temps et le Weber d'équilibre. Le premier est déterminé grâce à un compromis entre l'avancement des simulations d'atomisation et la représentativité de celles-ci. Le second, en s'appuyant sur les définitions construites, met en évidence des dépendances au Weber initial. Pour cela, des corrélations comportementales sont établies et permettent de relever, pour chaque définition, une valeur de Weber d'équilibre, au temps d'équilibre.

Ainsi les deux paramètres du modèle d'atomisation sont modélisés en fonction des nombres sans dimension initiaux de la simulation.

11.3. Conclusion sur l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine périodique

L'objectif principal de ce chapitre était de mettre en place une méthodologie d'analyse numérique de l'atomisation assistée d'une nappe liquide en configuration simplifiée (périodique), permettant de progresser vers le développement d'une modélisation aux grandes échelles de celle-ci.

Des grandeurs pertinentes ont été mesurées lors de la simulation directe de l'atomisation de la nappe, en particulier les évolutions en temps de la surface et de la topologie du liquide à travers l'algorithme de détection et classification décrite dans le précédent chapitre. Ces grandeurs ont été analysées et reliées au comportement qualitatif de la nappe, permettant de relier les variations aux phénomènes physiques.

Un temps caractéristique bâti à partir du rapport des densités et celui des flux de quantités de mouvements a été mis en évidence. Ce dernier permet de comparer des processus d'atomisation, en catégorisant chacune de leurs phases, indépendamment des points de fonctionnements. De plus, les évolutions des surfaces liquides et des diamètres caractéristiques ont été corrélées à partir des variations du Weber. Ces nouvelles corrélations ont permis de représenter les différents effets découplés induits par ces nombres sans dimension sur le processus d'atomisation.

Ensuite, des estimations des paramètres physiques utilisés dans la familles des modèles à densité d'interface ont été réalisées pour le cas particulier l'atomisation assistée, jusqu'à présent peu traité par la communauté scientifique. Ces deux paramètres sont un temps caractéristique et un nombre de Weber dit d'équilibre, indiquant un arrêt du phénomène d'atomisation.

Le temps d'équilibre est estimé grâce à un compromis entre l'avancement de l'atomisation et la représentativité des simulations tandis que les définitions de Weber d'équilibre reposent sur les corrélations, normalisées à partir du Weber initial. Ces deux paramètres sont représentés au moyen des corrélations et dépendent donc des nombres sans dimension des simulations.

Pour rappel, l'intérêt premier d'exploiter de telles configurations concernait le coût numérique réduit des simulations et donc la multiplication des points d'investigation. Toutefois, les effets induits par les conditions limites altèrent, plus ou moins tardivement, le déroulement de l'atomisation. En effet, toutes les analyses ainsi que les modélisations qui découlent de ce chapitre n'ont cessé d'établir des compromis entre l'avancement de l'atomisation et l'influence des conditions limites. Pour cette raison, une nouvelle configuration d'étude a été employée avec des conditions d'entrées air, liquide et de sorties plus réalistes. D'autre part, un injecteur a été mis en place, conformément aux expériences de Dejean [45] et Fernández [58], afin d'améliorer la compréhension du processus d'atomisation, d'affiner les mesures des propriétés du spray et ainsi établir et conforter une meilleure modélisation.

Cinquième partie

Simulations et analyses de nappes liquides cisillées dans un domaine réaliste

Introduction au déroulement de l'étude des nappes liquides cisailées dans un domaine réaliste

Ce chapitre présente et résume les différents travaux effectués dans le cadre de l'atomisation de nappes liquides utilisant une géométrie réaliste avec injecteur.

Cette partie débute par l'analyse d'une simulation de nappe avec injecteur, désignée par la suite dans cette partie comme cas de référence. Les conditions initiales de cette dernière sont extraites de la base de données de Dejean [45] et correspondent au cas de plus basse vitesse ($U_g = 50$ m/s). Plus précisément, ce sont les nombres sans dimension estimés à partir de ce point de fonctionnement qui sont conservés, grâce à la méthodologie de similitude décrite section 6.4. Tout ceci est réalisé afin de déterminer si ces nombres seuls permettent de reproduire une atomisation ligamentaire dans cette configuration géométrique et si cette dernière possède des caractéristiques, tel que le diamètre de Sauter, en accord avec celles du point d'expérience initial, chapitre 12.

À la suite de ce chapitre, une analyse des variations des paramètres géométriques sur le processus d'atomisation a été entreprise. L'objectif est d'illustrer l'influence de la résolution ainsi que de la longueur longitudinale sur le processus d'atomisation, tout en retenant, pour la suite, la plus favorable des configurations en vue d'une comparaison qualitative et quantitative avec l'expérience, chapitre 13.

Le chapitre suivant compare les simulations effectuées à partir des nombres sans dimension (recueillis des expériences de Dejean [45]) avec leurs propres résultats expérimentaux. Ceci a pour objectif d'illustrer si la conservation des nombres sans dimension permet de reproduire les variations comportementales observées dans les expériences telles que les caractéristiques associées au processus d'atomisation, chapitre 14.

Le dernier chapitre se concentre sur l'exploitation des résultats des simulations de nappes débitantes. Une première partie se concentre sur les comparaisons qualitatives avec les expériences de Dejean [45] ainsi que les précédentes simulations de Marter-Lagrange [116] et Blanchard [25]. La seconde partie est consacrée au paramétrage d'un modèle d'atomisation LES qui s'inspire des approches à aire interfaciale de Vallet [172], Lebas [99] et Chesnel [35]. Les fermetures des paramètres fondamentaux de ce type de modèle, notamment le temps caractéristique et le nombre de Weber à l'équilibre, se basent sur une approche phénoménologique qui s'appuie à son tour sur des corrélations, chapitre 15.

Simulation du cas de référence

Ce chapitre présente la simulation de l'atomisation assistée d'une nappe liquide générée par l'injecteur SHAPE de l'ONERA. L'objectif est de déterminer la faisabilité d'une atomisation ligamentaire dans cette configuration grâce à la conservation des nombres sans dimension pertinents. Pour cela, une analyse qualitative et quantitative de ce processus est réalisée.

Tout d'abord, les nombres sans dimension retenus des expériences de Dejean [45] sont listés section 12.1. Ces derniers doivent permettre de reproduire une atomisation ligamentaire tout en fournissant les conditions initiales de la simulation, grâce à la méthodologie de similitude.

Le domaine numérique représente une partie de l'injecteur SHAPE décrit section 12.2.

Afin d'évaluer les conclusions faites dans les simulations périodiques, une nouvelle échelle de temps normalisée a été construite à partir des longueurs d'ondes se développant naturellement au cours de la simulation, section 12.4.

Ensuite, une analyse qualitative et quantitative du processus d'atomisation est réalisée en s'appuyant sur la méthodologie d'analyse des nappes cisailées dans un domaine périodique. Cela commence par l'observation des différentes étapes de l'atomisation reproduite, section 12.5, et se termine par une mesure de ses caractéristiques globales, section 12.6.

Suite aux limitations de cette méthode dans cette nouvelle configuration, la construction d'un suivi des structures liquides fut réalisée section 12.7. Ce dernier reconstruit les évolutions des amas liquides provenant d'un même ensemble de structures, paquet liquide et permet leur caractérisation, section 12.8.

Une analyse supplémentaire a été réalisée sur un type d'amas particulier (les gouttes sortantes) dans chaque paquet, section 12.9.

Enfin, une première comparaison avec les résultats d'expérience de Dejean [45] a été réalisée en s'appuyant sur les données récupérées des gouttes sortantes, section 12.10.

Sommaire

12.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	191
12.2. Géométrie et maillage	191
12.3. Calcul des longueurs d'ondes	192
12.4. Calcul du temps caractéristique	193
12.5. Observations du déroulement de l'atomisation	193
12.6. Caractérisation générale du processus d'atomisation	195
12.6.1. Indicateurs globaux	195
12.6.2. Indicateurs locaux	196
12.7. Suivi de structures liquides par longueur d'ondes d'émission	198
12.7.1. Suivi des amas par approximation point particule	199
12.7.2. Lien d'affiliation	203
12.7.3. Catégorisation des amas	205
12.7.4. Identification et séparation des paquets	207
12.8. Caractérisation temporelle du processus d'atomisation	208
12.8.1. Caractérisation générale des paquets	208
12.8.2. Présence des ligaments	210
12.8.3. Caractérisation des gouttes	211

12.9. Analyse des gouttes sortantes	213
12.9.1. Détection de sortie des gouttes	213
12.9.2. Définition d'un Weber inspiré des mesures expérimentales	213
12.9.3. Reconstruction de la vitesse gaz au centre de gravité d'une goutte	213
12.9.4. Weber des gouttes sortantes	214
12.9.5. Caractérisation des gouttes sortantes par paquet	215
12.10 Comparaison avec l'expérience	216
12.10.1.Moyenne par cycles	216
12.10.2.Moyenne sur l'ensemble de la simulation	217
12.11 Conclusion de l'étude du cas de référence	218

12.1. Nombres sans dimension et conditions initiales

Cette nouvelle configuration a pour objectif de reproduire une atomisation ligamentaire grâce à la conservation de certains nombres sans dimension issus des points de fonctionnement de Dejean [45], Table 6.2, plus précisément dans le cas $U_g = 50$ m/s, Table 6.1.

Cette conservation est effectuée en employant la méthodologie de similitude, section 6.4, qui permet de maintenir les nombres sans dimension Table 12.1 et d'en déduire les conditions initiales Table 12.2.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
$1.2 \cdot 10^{-2}$	598.8	4954.1	11.52	$1.796 \cdot 10^{-2}$	0.75

TABLE 12.1. – Nombres sans dimension utilisés pour le cas de référence.

ρ_g	U_g	μ_g	ρ_l	U_l	μ_l	σ
12	15.81	$1.8 \cdot 10^{-5}$	10^3	2	$1.002 \cdot 10^{-3}$	$5.9 \cdot 10^{-2}$
kg/m ³	m/s	Pa s	kg/m ³	m/s	Pa s	N/m

TABLE 12.2. – Conditions initiales utilisées pour le cas de référence.

12.2. Géométrie et maillage

Le domaine géométrique de cette étude s'inspire du banc expérimental SHAPE de l'ONERA, section 6.2. Ce dernier possède des directions longitudinales et verticales étendues, $(\vec{x}$ et $\vec{y})$, comparativement à celle transverse, \vec{z} .

Le domaine de calcul a été dimensionné en incluant une partie de l'injecteur ainsi qu'une longueur et hauteur suffisantes pour minimiser les contraintes sur le mouvement de la nappe.

La dernière direction, transverse, est réduite, par rapport aux deux autres, pour plusieurs raisons. La première est la similitude comportementale avec le banc SHAPE qui considère que les potentiels effets de bords sont atténués lorsque la largeur transversale est grandement supérieure à l'épaisseur de la nappe. Ce critère est respecté dans cette étude puisque la géométrie employée implique un ratio supérieur à dix, $L_z/\alpha \approx 13$. La seconde raison concerne le coût numérique lié à la simulation qui peut devenir prohibitif si cette direction s'élargit. Un doublement de la largeur multiplie par deux le coût associé, déjà significatif. Le domaine géométrique employé par la suite est résumé Table 12.3.

L_x	L_y	L_z
34.56	34.56	3.84
mm	mm	mm

TABLE 12.3. – Domaine géométrique utilisé pour le cas de référence.

Le maillage de cette étude, Table 12.4, utilise un grand nombre de points et de processus MPI du fait des directions longitudinales et verticales étendues.¹

1. Toutes les simulations d'atomisations de nappes liquides cisailées dans un domaine réaliste ont associés chaque processus MPI à un cœur physique de calcul pour des raisons de performances. Ainsi le nombre de processus MPI total correspond au nombre total de cœurs employés.

np_x	np_y	np_z	np_{tot}	$nproc_x$	$nproc_y$	$nproc_z$	$nproc_{tot}$	α/Δ	Δ (μm)
1152	1152	128	$169.8 \cdot 10^6$	18	18	2	648	10	30

TABLE 12.4. – Maillage utilisé pour le cas de référence.

12.3. Calcul des longueurs d'ondes

Cette configuration géométrique, proche du banc SHAPE, permet de s'abstenir d'imposer une longueur d'onde initiale puisqu'aucune vitesse perturbatrice n'est nécessaire au déclenchement de l'atomisation. Sous l'action du cisaillement provoqué par l'écoulement d'air, le liquide oscille, développe et entretient ses propres longueurs d'ondes, Figure 12.1.

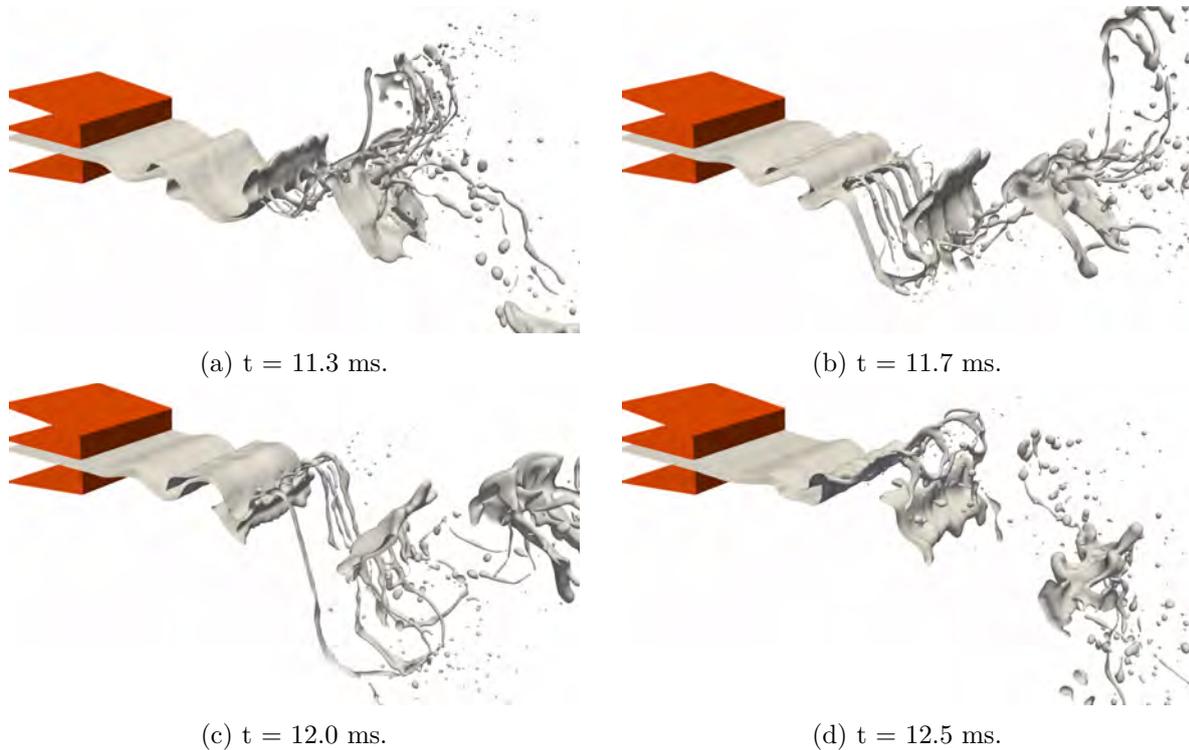


FIGURE 12.1. – Zoom sur le développement des longueurs d'ondes de la nappe liquide.

Des profils de côté de la nappe liquide sont relevés au cours de la simulation afin d'estimer ces longueurs d'ondes longitudinales. Avec l'aide des bibliothèques Python d'analyses d'image, tels que Numpy, Scipy et PIL (Python Imaging Library), ces profils sont pixelisés, transformés sous forme matricielle, pour calculer la hauteur moyenne de la nappe, y_{moy} , ainsi que son écart (Δx , Δy) par rapport à une référence (y_{ref} , x_{ref}), Figure 12.2.

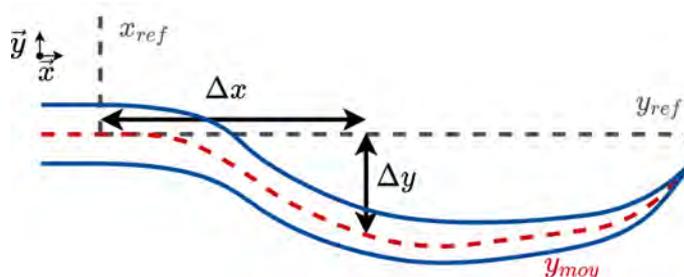


FIGURE 12.2. – Schématisation du procédé d'obtention d'une longueur d'onde.

Ainsi, le premier extremum détecté, lorsque le décalage vertical (Δy) cesse de croître, représente l'amplitude maximale d'une longueur d'onde tandis que celui horizontal (Δx) illustre la moitié de sa valeur finale, $\lambda_{ax}/2$. Deux exemples de telles mesures sont résumés ci-dessous, Figure 12.3.

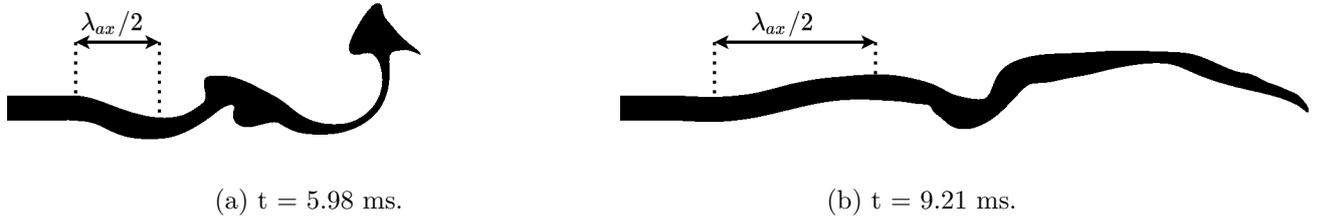


FIGURE 12.3. – Mesures de longueurs d'ondes longitudinales.

Au cours de la simulation, plusieurs longueurs d'ondes se développent sur le profil de la nappe, Figure 12.4. Ces dernières sont majoritairement petites, proches du millimètre, avec quelques exceptions proches des deux millimètres. La présence de ces plus grandes longueurs d'ondes, semble initialiser un schéma répétitif d'apparition de longueurs d'ondes de plus en plus petites.

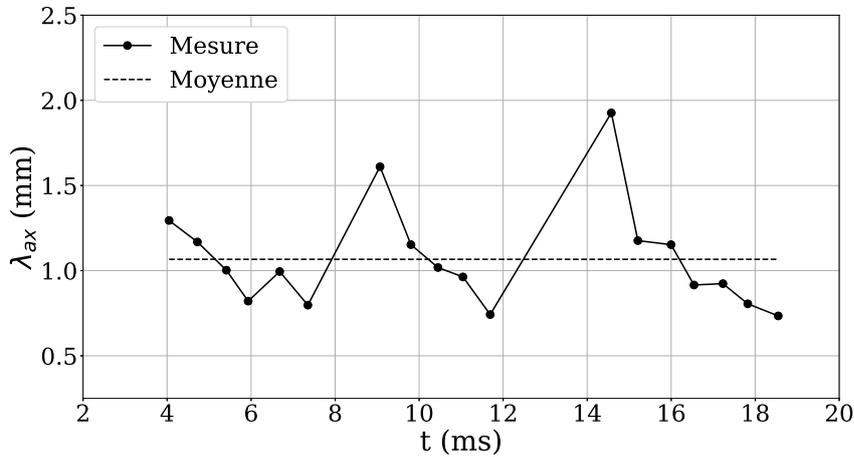


FIGURE 12.4. – Détection des longueurs d'ondes longitudinales avec la moyenne associée.

Une longueur d'onde moyenne est estimée à partir de ces relevés :

$$\langle \lambda_{ax} \rangle = 1.07 \text{ mm} \quad (12.1)$$

12.4. Calcul du temps caractéristique

Le temps caractéristique construit dans les études périodiques est employé dans cette étude, section 8.4. Ainsi, la valeur moyenne des longueurs d'ondes détectées durant la simulation, $\langle \lambda_{ax} \rangle$ équation (12.1), est associée à celle nécessaire pour la définition de ce dernier.

$$t^* = t \frac{U_g}{\langle \lambda_{ax} \rangle} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^C \quad (12.2)$$

$$t^* = t \frac{U_l}{\langle \lambda_{ax} \rangle} \sqrt{\frac{MFR}{\hat{\rho}}} \hat{\rho}^C \quad \text{avec } C = -0.4 \quad (12.3)$$

12.5. Observations du déroulement de l'atomisation

Une première analyse qualitative du déroulement du processus d'atomisation est réalisée à l'aide des illustrations de l'interface liquide, Figure 12.5. L'injecteur, bien que n'étant pas représenté,

est toujours pris en compte dans les simulations.²

L'injection constante de liquide fait grossir la nappe liquide et lui permet de se déployer au sein du domaine de simulation, Figures 12.5a et 12.5b. Le débit d'air entrant, incliné vers la nappe d'un angle $\theta_{injecteur}$ (6°), cisaille le liquide sortant qui commence à osciller, Figure 12.5b.



(a) $t^* = 5.7$



(b) $t^* = 7.8$

Ces oscillations sont entretenues et amplifiées par l'écoulement gazeux qui, en étirant le liquide, provoque des ruptures locales, Figure 12.5c. Ces dernières engendrent une multitude de structures liquides qui peuvent être rassemblées en catégories. La première concerne toutes les structures ligamentaires générées par des ruptures de la nappe débitante en membrane, Figures 12.5c et 12.5d. Sous l'action du cisaillement et des instabilités de Rayleigh-Plateau, ces ligaments finissent par se rompre en structures de plus en plus petites et se stabilisent en gouttes en aval du domaine.



(c) $t^* = 9.3$



(d) $t^* = 11.9$

La seconde catégorie regroupe toutes les structures liquides restantes de topologie quelconque, qui ne sont détachées de la nappe débitante que par une rupture transversale totale, Figures 12.5e, 12.5f et 12.5g. Ces dernières, sous l'action de l'écoulement gazeux et des déstabilisations surfaciques s'y développant, se fragmentent en plus petites structures et rejoignent le même déroulement d'atomisation que celui décrit pour la première catégorie, Figures 12.5e 12.5f 12.5g et 12.5h.



(e) $t^* = 14.2$



(f) $t^* = 16.7$

2. Les représentations sont obtenues via des machines de visualisation de l'ONERA ou de centres de calculs sur lesquels ont été réalisées les simulations. Ces illustrations sont obtenues grâce à des scripts BASH utilisant eux-mêmes l'interface Python incluse dans Paraview, PvPython.

Ce lâcher de structures liquides semble se répéter puisque la nappe, après avoir généré le dernier d'entre eux Figure 12.5g, recommence à accumuler du liquide avant de démarrer un nouveau cycle Figures 12.5h et 12.5c.

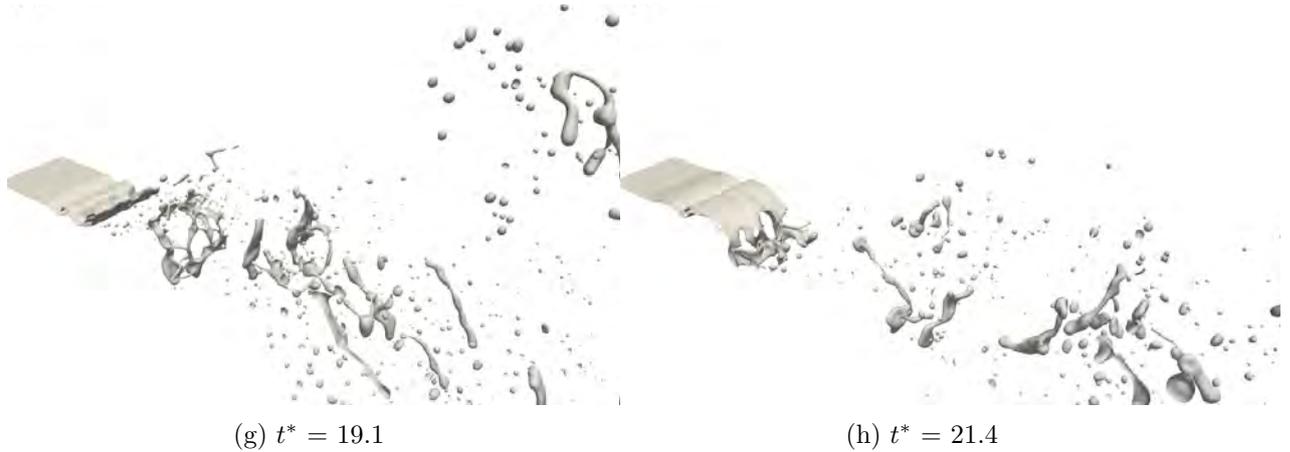


FIGURE 12.5. – Interface lors de la pulvérisation du liquide, cas de référence.

Ce schéma répétitif de génération de structures liquides est visible au-travers de la détection des longueurs d'ondes et des allures de l'interface.

12.6. Caractérisation générale du processus d'atomisation

Ce processus d'atomisation ligamentaire semble générer une grande quantité de gouttes et avoir un taux d'atomisation élevé. Pour quantifier ces observations, certains des indicateurs utilisés dans les études de nappes périodiques sont ré-employés.

12.6.1. Indicateurs globaux

À la différence des nappes périodiques, le volume liquide au sein de la simulation n'est pas constant, c'est pourquoi, son évolution temporelle ainsi que celle de sa surface associée sont analysées. D'autre part, le volume ainsi que la surface de la nappe sont ajoutés afin de compléter cette l'analyse. De ce fait, l'écart entre le volume total et celui de la nappe représente la quantité de liquide détachée de la nappe toujours présente dans le domaine de simulation, Figures 12.6 et 12.7. Ces deux types de grandeurs sont normalisées par leurs valeurs initiales respectives, $V_{l \text{ init}}$ et $S_{l \text{ init}}$ équations (7.6) et (7.7).

Le débit liquide fixe, imposé par la condition d'injection, se détecte dès le début de la simulation et jusqu'à $t^* \leq 9.3$ avec des évolutions très proches pour le volume liquide total et celui de la nappe, Figure 12.5c.

Des écarts grandissants entre ces deux catégories se manifestent au-delà de cet instant et illustrent la séparation, le détachement de plusieurs structures liquides de la nappe débitante, Figures 12.5c, 12.5d et 12.5e. Bien que ces dernières soient advectées en aval par l'écoulement gazeux, aucune de ces structures ne sort du domaine puisque le volume total conserve sa pente initiale, tel que $t^* \leq 16$. Jusqu'à cet instant, $t^* \approx 16$, l'écart entre le volume total et celui de la nappe n'a fait que croître jusqu'à y être maximisé. Cela signifie une augmentation régulière du volume de structures détachées qui peut être associée à un processus de remplissage du domaine numérique.

Passée cette phase de remplissage, le volume total décroît bien que la nappe injecte constamment du liquide, pour $t^* \leq 24$. Cette baisse est causée par l'advection des structures liquides générées précédemment qui atteignent la sortie, Figures 12.5f 12.5g et 12.5h. Cette phase de réduction de l'écart entre le volume total et celui de la nappe peut être assimilée à un processus de vidage du domaine numérique qui se termine lorsque ce dernier est minimisé à $t^* \approx 24$.

Au-delà de cet instant, de nouveaux cycles composés alternativement d'une phase de remplissage et de vidage se distinguent et supposent la présence d'un phénomène périodique.

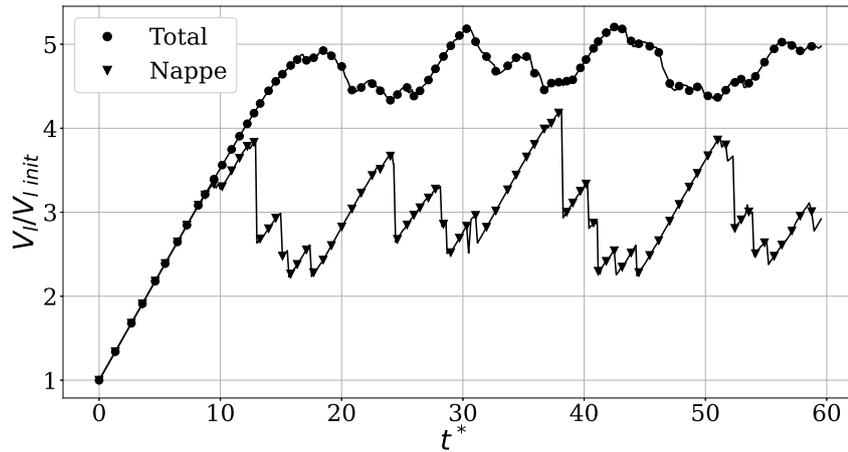


FIGURE 12.6. – Volume liquide, cas de référence.

La même décomposition en phases de remplissage et de vidage s'applique sur les évolutions de surface totale et de la nappe, Figure 12.7. Parmi ces phénomènes s'ajoute la production de surface inhérente au liquide qui se fragmente et se convertit en gouttes lors de son déplacement en aval par l'écoulement gazeux. Cette génération supplémentaire de surface explique que les pentes caractérisant le début des phases de remplissage/vidage soient plus raides que pour le volume.

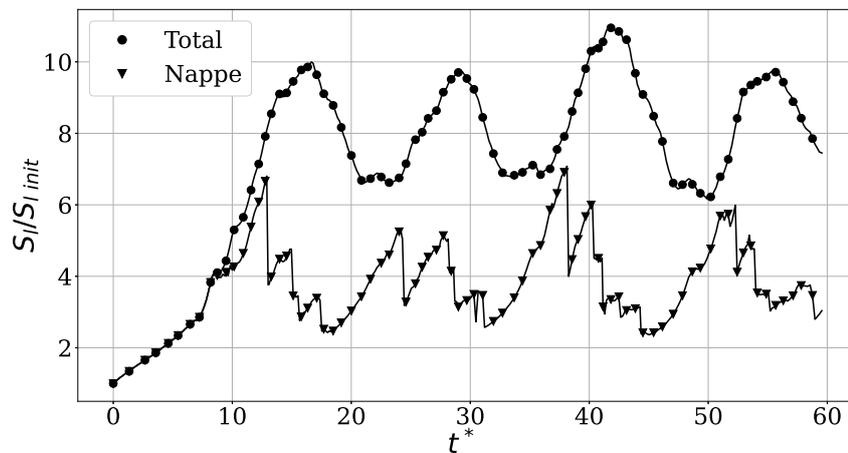


FIGURE 12.7. – Surface liquide, cas de référence.

12.6.2. Indicateurs locaux

Les classifications en fonction du diamètre sont normalisées par la taille de la maille du calcul, Δ issue de la Table 12.4. Le rapport d/Δ représente différentes classes de diamètres permettant de caractériser par tailles les gouttes détectées durant la simulation.

La distribution du nombre de gouttes illustre la présence de ces phases de remplissage/vidage, du domaine numérique, Figure 12.8. Ces dernières durent approximativement $5 t^*$ et se succèdent pour former un cycle répétitif tous les $10 t^*$ environ. Au sein de chacun de ces cycles, le maximum de gouttes détectées se situe dans la classe de taille la plus petite, $d/\Delta \leq 2$. La valeur atteinte par ce dernier est proche des 330 gouttes, indépendamment du cycle. Enfin, les distributions du nombre de gouttes sont similaires dans chacun de ces cycles puisque les valeurs atteintes, lorsque les classes de diamètres s'agrandissent, sont analogues.

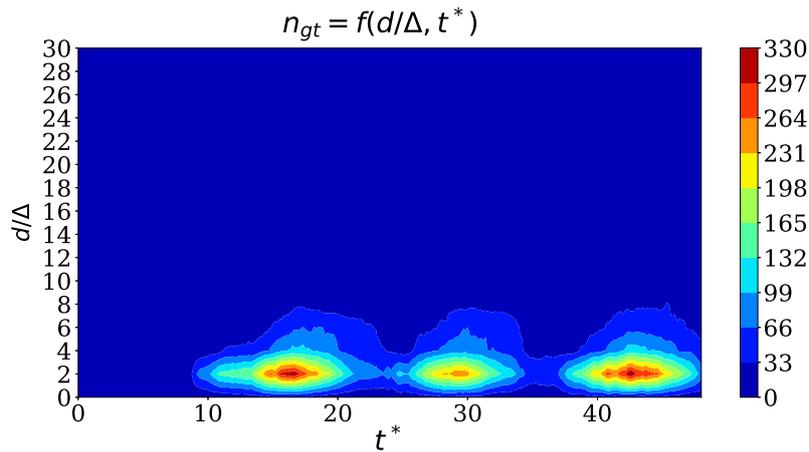


FIGURE 12.8. – Distribution du nombre de gouttes, cas de référence.

La distribution du volume de gouttes appuie l'hypothèse de similarité des processus d'atomisation pour chaque cycle de remplissage/vidage du domaine numérique Figure 12.9. Le volume de gouttes est réparti de manière analogue, quel que soit le cycle, avec des maximums semblables atteints dans chaque phase de remplissage/vidage.

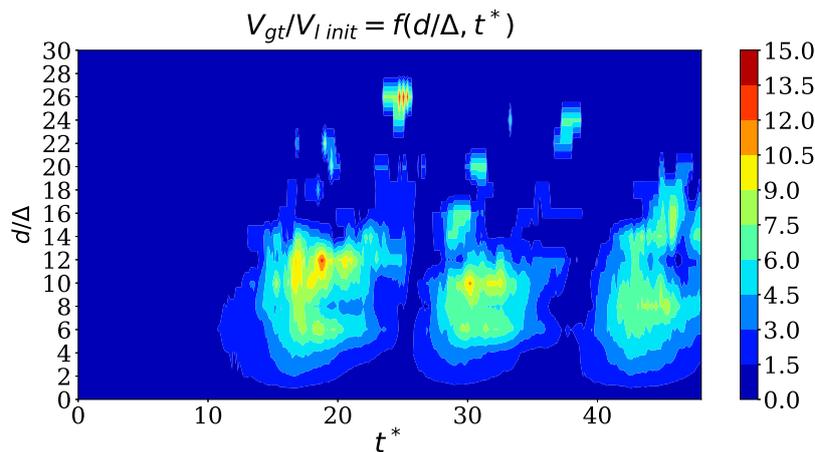


FIGURE 12.9. – Distribution du volume de gouttes, cas de référence.

Toutefois la méthodologie d'analyse employée dans l'étude des nappes périodiques n'est pas transposable dans cette configuration géométrique. En effet, cette procédure d'analyse s'appuie sur le suivi de l'atomisation d'une longueur d'onde de nappe liquide. Les quantités recueillies de manière intégrale, volume, nombre etc, sont représentatives de l'évolution de l'atomisation de cette longueur d'onde. Or, dans cette configuration géométrique, plusieurs longueurs d'ondes de nappe liquide peuvent être générées et se trouver simultanément dans le domaine de calcul, biaisant les opérations et indicateurs globaux.

Pour cette raison, une reconstruction, ainsi qu'un suivi des structures générées par longueur d'ondes a été mis en place.

12.7. Suivi de structures liquides par longueur d'ondes d'émission

Un suivi de structures liquides émises par longueur d'ondes a été mis en place afin de mesurer leurs processus d'atomisation, séparément des autres structures, Figure 12.10. Par définition, un paquet liquide désigne l'ensemble des structures qui sont générées par oscillation de la nappe débitante (leur identification est présentée par la suite). Ainsi la représentation d'un instant de la simulation fait ressortir la présence de plusieurs paquets, ayant des avancements d'atomisation différents, et donc devant être analysés séparément, indépendamment les uns des autres, Figure 12.11. Ces différents paquets sont schématisés et illustrés au moyen de couleurs, Figures 12.10 et 12.11.

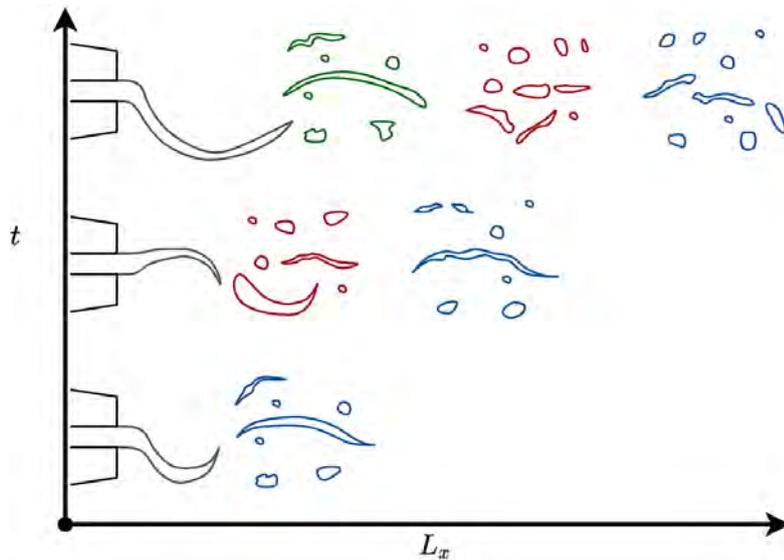


FIGURE 12.10. – Schématisation de la génération de paquets liquides.

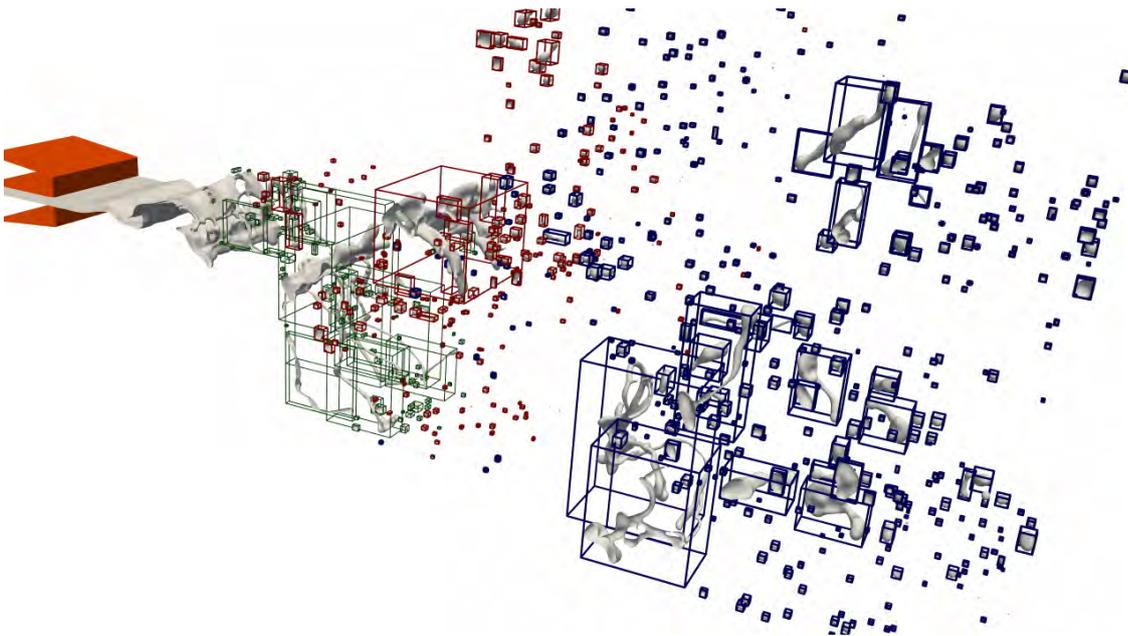


FIGURE 12.11. – Paquets liquides représentés durant la simulation.

12.7.1. Suivi des amas par approximation point particule

La première étape pour réaliser cette analyse par paquet liquide a été la mise en place d'un suivi de chacune des structures liquides détectées par instant d'analyse au moyen d'une approximation point particule. L'objectif est de permettre l'identification et le suivi temporel des structures ainsi qu'avoir accès à l'évolution de leurs propriétés.

Pour cela, l'algorithme de détection des structures liquides, décrit dans la chapitre 5, fut employé. Ce dernier permet de générer une base de données par sorties enregistrées (de la simulation) et cette dernière contient des informations locales et intégrales sur les structures liquides détectées durant cet instant d'analyse. Ainsi, le rassemblement de toutes ces bases de données contient, sans être directement accessible, toutes les évolutions des structures liquides détectées durant la simulation. Pour cette raison, ces bases de données ainsi que leur compilation sont qualifiées de désordonnées car aucun lien n'est initialement présent entre les structures détectées dans les analyses successives.

L'objectif de cette méthode de suivi est d'établir des liens chronologiques entre les structures et de reconstruire leurs évolutions à partir de cette compilation de données désordonnées. Chacune des sorties enregistrées durant la simulation correspond à un instant d'analyse. Ce suivi estime la position d'une structure liquide i à l'instant $k+1$ (base de données $k+1$), à partir de ses caractéristiques à l'instant d'analyse précédent k (base de données k). Suite à cela, une comparaison en volume et en position est réalisée entre cette estimation et l'ensemble des structures présentes dans la prochaine base de données, en vue d'une potentielle correspondance. Le suivi d'une structure, entre deux bases de données désordonnées est schématisé Figure 12.12.

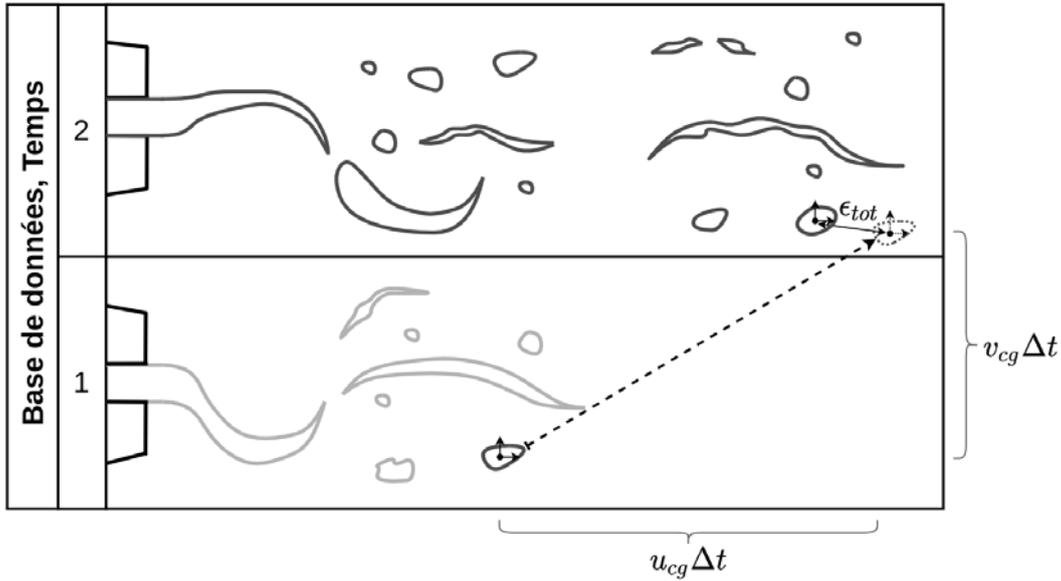


FIGURE 12.12. – Suivi d'une structure entre deux bases de données par approximation point particule.

Les informations nécessaires au suivi d'une structure i à l'instant k sont résumées ci-dessous.

$$V(i, k); \quad d(i, k) = 2r(i, k) = 2 \left(\frac{3V(i, k)}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}}; \quad \vec{Pos}_{cg}(i, k) = \begin{pmatrix} x_{cg}(i, k) \\ y_{cg}(i, k) \\ z_{cg}(i, k) \end{pmatrix}; \quad \vec{U}_{cg}(i, k) = \begin{pmatrix} u_{cg}(i, k) \\ v_{cg}(i, k) \\ w_{cg}(i, k) \end{pmatrix}$$

$$\vec{l}(i, k) = \begin{pmatrix} l_x(i, k) \\ l_y(i, k) \\ l_z(i, k) \end{pmatrix}; \quad \vec{Pos}_{max}(i, k) = \begin{pmatrix} x_{max}(i, k) \\ y_{max}(i, k) \\ z_{max}(i, k) \end{pmatrix}; \quad \vec{Pos}_{min}(i, k) = \vec{Pos}_{max}(i, k) - \vec{l}(i, k)$$

Avec d , r et V le diamètre, le rayon et le volume d'une structure tandis que $\overrightarrow{Pos}_{cg}$ et \overrightarrow{U}_{cg} sont ses vecteurs position et vitesse au centre de gravité. Le vecteur $\overrightarrow{Pos}_{max}$ contient les coordonnées maximales de la structure dans chacune des directions et le vecteur \overrightarrow{l} ses dimensions.

Deux structures, présentes sur deux bases de données, peuvent correspondre si la distance entre leurs centres de gravités (ϵ_{dist}), leurs variations de volumes (ϵ_v) ainsi que leurs types respectifs (ϵ_{type}) coïncident et respectent les critères suivants équation (12.4).

$$\begin{cases} \epsilon_{type}(i, j, k) = 0 \\ \epsilon_v(i, j, k) \leq \epsilon_v \text{ seuil} \\ \epsilon_{dist}(i, j, k) \leq \epsilon_{dist} \text{ seuil} \end{cases} \quad (12.4)$$

Néanmoins, plusieurs structures peuvent respecter tout ces critères, c'est pourquoi le choix final s'effectue en minimisant la somme des deux derniers, équation (12.5).

$$\min(\epsilon_{tot}(i, j, k)) = \min(\epsilon_v(i, j, k) + \epsilon_{dist}(i, j, k)) \quad (12.5)$$

Le premier critère de ce suivi concerne le type de structure couramment analysée, ϵ_{type} , qui est décomposé en deux afin d'assurer un suivi le plus cohérent possible. Le premier type regroupe toutes les structures dont les extrema sont strictement contenus dans le domaine de simulation. Le second englobe toutes les structures restantes, c'est-à-dire celles étant limitées par, au moins, un côté de ce dernier. Ainsi les candidats possibles au suivi d'une structure d'un certain type ne peuvent qu'être du même type. Cette contrainte limite les erreurs d'affectation de candidats entre deux types de structures.

Pour réaliser cela, un critère ϵ_{type} est instauré dans le choix des potentiels candidats. Si une structure i de la base de données k est limitée par le domaine de simulation alors les candidats retenus de la base de données $k + 1$ doivent l'être également. À l'opposé, ce raisonnement s'applique aux structures strictement à l'intérieur du domaine.

Cette contrainte supplémentaire permet de reconstruire un suivi d'amas évoluant exclusivement à l'intérieur ou en bord de domaine de simulation. Les dimensions de ce dernier sont résumées ci-dessous, équations (12.6).

$$\overrightarrow{Pos}_{dom \ max} = \begin{pmatrix} x_{dom \ max} \\ y_{dom \ max} \\ z_{dom \ max} \end{pmatrix} \quad \overrightarrow{Pos}_{dom \ min} = \begin{pmatrix} x_{dom \ min} \\ y_{dom \ min} \\ z_{dom \ min} \end{pmatrix} \quad (12.6)$$

Une structure i de la base de données k est strictement à l'intérieur du domaine de simulation si les deux erreurs, $\epsilon_{type_1}(i, k)$ et $\epsilon_{type_2}(i, k)$, sont positives et unitaires, équations (12.7) et (12.8).

$$\epsilon_{type_1}(i, k) = \begin{cases} 1 & \text{si } \overrightarrow{Pos}_{max}(i, k) < \overrightarrow{Pos}_{dom \ max} - \Delta \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (12.7)$$

$$\epsilon_{type_2}(i, k) = \begin{cases} 1 & \text{si } \overrightarrow{Pos}_{min}(i, k) > \overrightarrow{Pos}_{dom \ min} + \Delta \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (12.8)$$

Ces deux conditions permettent d'obtenir le type de la structure courante i , via la valeur de ϵ_{type_3} . Cette dernière est unitaire pour les structures strictement dans le domaine de simulation et nulle pour les autres, équation (12.9).

$$\epsilon_{type_3}(i, k) = \begin{cases} 1 & \text{si } \epsilon_{type_1}(i, k) + \epsilon_{type_2}(i, k) = 2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (12.9)$$

L'obtention du type d'un candidat j à l'instant $k + 1$ suit la même méthodologie, équations (12.7) (12.8) et (12.9). Ainsi, le candidat j à l'instant $k + 1$ et la structure i à l'instant k doivent être de même type. Cela se traduit par une erreur de type finale nulle, ϵ_{type} , équation (12.10).

$$\epsilon_{type}(i, j, k) = |\epsilon_{type_3}(i, k) - \epsilon_{type_3}(j, k + 1)| \quad (12.10)$$

Le second critère concerne les variations de volume entre une structure i à l'instant k et son candidat j , à l'instant $k + 1$. Ce critère réduit le nombre des potentiels candidats en ne conservant que ceux ayant un volume proche, équation (12.11). D'autre part, cette erreur de volume, ϵ_v , possède deux versions de normalisation, Δ^3 ou $V(i, k)$, en fonction du volume de la structure i à l'instant k . Cette distinction est effectuée afin d'alléger le coût mémoire d'une telle analyse. Les plus petites structures ne subissent que peu de variations de volume entre deux instants d'analyses. Cela est assuré par la tension de surface qui stabilise les interfaces et atténue les instabilités pouvant s'y développer. Dans cette situation l'erreur de volume est normalisée par le volume de la maille, Δ^3 . A contrario, une volumineuse structure peut être soumise à un ensemble de phénomènes perturbateurs (cisaillement, collision, instabilité) entre deux instants d'analyses et ainsi générer, en plus de la structure initiale restante, une multitude de nouvelles. Ces dernières peuvent ne représenter qu'un faible pourcentage du volume initial mais avoir, en les regroupant toutes, un volume supérieur au seuil défini pour les petites structures. Cela conduirait à une nouvelle affectation en mémoire de la large structure restante (dont le volume n'a que peu varié) et ainsi entraîne un surcoût inutile. Pour éviter cela et réduire le coût mémoire global, les larges structures ont un critère d'erreur en volume plus permissif et normalisé par leur propre volume, V .

$$\epsilon_v(i, j, k) = \begin{cases} |V(i, k) - V(j, k + 1)|/\Delta^3 & \text{si } d(i, k) \leq d_{seuil} \\ |V(i, k) - V(j, k + 1)|/V(i, k) & \text{si } d(i, k) \geq d_{seuil} \end{cases} \quad (12.11)$$

Le dernier critère d'erreur, ϵ_{dist} , mesure la distance entre la position du centre de gravité de l'estimation de la structure i à l'instant $k + 1$, $\vec{Pos}(i, k) + \vec{U}_{cg}(i, k)\Delta t$, et la position du centre de gravité de la structure j au même instant, équation (12.12). Le terme $\Delta t = t(k + 1) - t(k)$, représente l'intervalle de temps entre deux instants d'analyse (deux bases de données).

Une décomposition identique à l'erreur en volume est réalisée en ajustant la mesure de cette erreur de distance en fonction du diamètre des structures. Cette décomposition reprend le raisonnement appliqué au cas du volume. La candidate (j) doit avoir son centre de gravité proche de l'estimation faite pour la structure (i), puisque les variations de volume sont faibles. A contrario, les larges structures ne se basent que sur leurs propriétés, ici le rayon équivalent calculé à partir du volume, pour déterminer le candidat.

$$\epsilon_{dist}(i, j, k) = \begin{cases} \left\| \vec{Pos}_{cg}(i, k) + \vec{U}_{cg}(i, k)\Delta t - \vec{Pos}_{cg}(j, k + 1) \right\|/\Delta & \text{si } d(i, k) \leq d_{seuil} \\ \left\| \vec{Pos}_{cg}(i, k) + \vec{U}_{cg}(i, k)\Delta t - \vec{Pos}_{cg}(j, k + 1) \right\|/r(i, k) & \text{si } d(i, k) \geq d_{seuil} \end{cases} \quad (12.12)$$

Le diamètre seuil, employé pour séparer les normalisations, est défini arbitrairement comme étant un multiple de la taille de maille de la simulation, équation (12.13).

$$d_{seuil} = A\Delta \quad (12.13)$$

Les potentiels candidats pour le suivi d'une structure doivent donc être de même type et posséder des erreurs, ϵ_v et ϵ_{dist} , en dessous des seuils maximums, $\epsilon_v \text{ seuil}$ et $\epsilon_{dist} \text{ seuil}$. Cependant, différentes formulations existent pour le calcul de ces erreurs, équations (12.11) et (12.12), c'est pourquoi plusieurs valeurs y sont associées en fonction de la normalisation, Table 12.5.

Ces derniers sont mis en relation grâce au diamètre seuil qui doit respecter, dans chacune des deux formulations, les valeurs seuils qui y sont associées, équation (12.14).

d	$\leq d_{seuil}$	$\geq d_{seuil}$
$\epsilon_v \text{ seuil}$	ϵ_{v1}	ϵ_{v2}
$\epsilon_{dist \text{ seuil}}$	ϵ_{dist1}	ϵ_{dist2}

TABLE 12.5. – Seuils employés pour l'estimation des erreurs.

$$\begin{cases} |V(i, k) - V(j, k + 1)|/\Delta^3 & = \epsilon_{v1} \\ |V(i, k) - V(j, k + 1)|/V(i, k) & = \epsilon_{v2} \end{cases} \quad \text{avec} \quad V(i, k) = V_{seuil} = \frac{\pi (d_{seuil})^3}{6} = \frac{\pi (A\Delta)^3}{6} \quad (12.14)$$

Ainsi, les deux seuils ϵ_{v1} et ϵ_{v2} s'expriment en fonction de la constante A du diamètre seuil, équation (12.15).

$$A = \sqrt[3]{\frac{6\epsilon_{v1}}{\pi\epsilon_{v2}}} \quad (12.15)$$

Le même raisonnement s'applique sur la mesure de l'écart en distance, équation (12.16).

$$A = \frac{2\epsilon_{dist1}}{\epsilon_{dist2}} \quad (12.16)$$

De cette manière, le choix du diamètre seuil et des seuils correspondant aux plus petites structures (ϵ_{v1} et ϵ_{dist1}), généralement associées à des gouttes, permet de déterminer ceux restants.

$$A = 5 \quad \epsilon_{v1} = 10 \quad \epsilon_{dist1} = 5 \quad (12.17)$$

La plus grande des petites structures qui définit le seuil entre les deux formulations possède un diamètre $d_{seuil} = 5\Delta$ pour un volume équivalent proche de $V_{seuil} = 65.4\Delta^3$. Dans le cas de petites structure, le seuil maximal de décalage des centres de gravité est estimé à 5Δ tandis que celui en volume est de $10\Delta^3$. Pour les plus grandes structures cela correspond à une erreur relative en volume maximale de 15 % et une sur le rayon de 200 %.

d	$\leq d_{seuil}$	$\geq d_{seuil}$
$\epsilon_v \text{ seuil}$	10	0.15
$\epsilon_{dist \text{ seuil}}$	5	2.0

TABLE 12.6. – Valeurs des seuils employés pour l'estimation des erreurs.

Lorsque le suivi des amas est terminé, chaque amas, structure, liquide peut être défini par une balise unique, Figure 12.13, et rassemble dans sa propre liste de données, dite ordonnée, toutes les informations qui lui sont relatives durant sa durée d'existence, Figure 12.14. La Figure 12.13 représente deux bases de données, deux instants de simulation, avec le balisage des amas superposés. Pour rappel les amas détectés dans la base de données k existent dans la base $k + 1$, si un candidat local (de la base $k + 1$) respecte les critères de volume et de surface.

Plusieurs amas de la base de données n°1, advectés en aval, sont visibles dans la n°2 (amas 2, 3, 4, 5, 6 et 7). Ceci n'est pas toujours le cas puisque des générations, séparations, collisions etc, de structures peuvent se produire entre deux instants d'analyses (amas 8 manquant dans la base n°2). Ces situations mènent à la prise en compte de ces nouvelles structures comme de nouveaux amas ayant un nouveau numéro de balise (amas 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16 et 17). Un traitement particulier est réalisé sur la nappe pour qu'un seul numéro (amas 1) lui soit affecté tout le long de la simulation (malgré les importantes variations de volume).

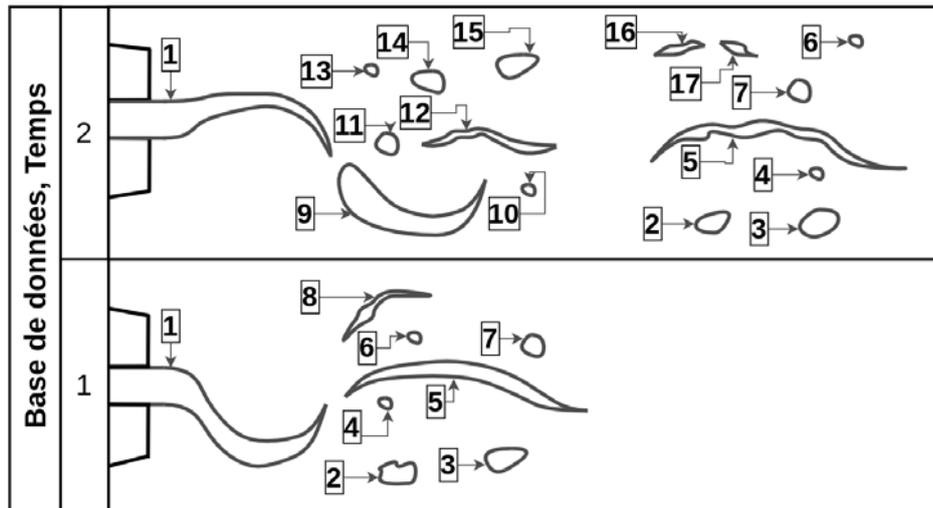


FIGURE 12.13. – Balises associées aux structures après la méthode de suivi.

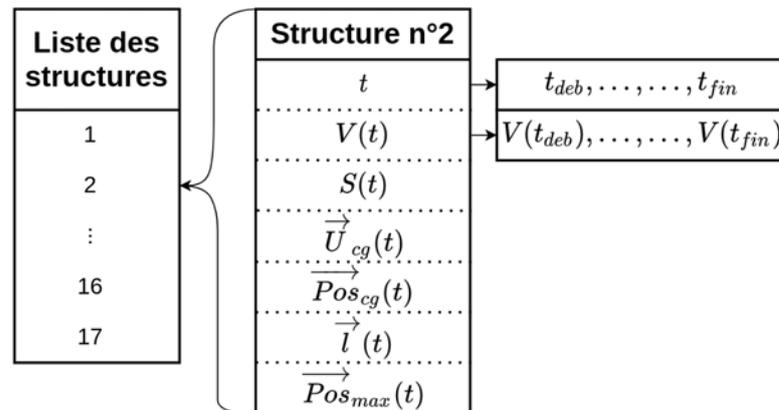


FIGURE 12.14. – Nouvelle base de données, dite ordonnée, formée par les structures reconstruites de la méthode de suivi.

Les phénomènes de génération, destruction, de structures liquide en cours d'atomisation doivent subir un traitement spécial pour ne pas perdre l'information d'appartenance au paquet correspondant. Un exemple est visible avec la structure 8 qui se divise en deux et génère les numéros 16 et 17, Figure 12.13.

12.7.2. Lien d'affiliation

Afin de conserver un suivi des structures liquides par paquet, un lien d'affiliation pour chacune de ces dernières doit être systématiquement mis en place. Les nouvelles structures liquides produites par injection liquide, coalescence ou fragmentation, durant le processus d'atomisation doivent conserver leur appartenance à leur paquet liquide originel.

Pour réaliser cela, le lien d'affiliation s'appuie sur un calcul d'écart entre enveloppes d'amas. Le terme enveloppe désigne le plus petit parallélépipède rectangle qui englobe une structure liquide donnée, Figure 12.15.

Pour rappel, le suivi des amas a permis d'extraire et de classifier les informations relatives à chaque structure liquide à partir de la compilation des bases de données désordonnées précédentes. L'ensemble de ces nouvelles structures reconstruites constitue donc une nouvelle base de données désignée par la suite comme "ordonnée", Figure 12.14.

La création des liens d'affiliation repose sur cette nouvelle base de données dite "ordonnée" qui permet de déterminer, pour chacune de ces nouvelles structures, ses parents. Une structure liquide peut être désignée comme parent lorsque cette dernière en génère une nouvelle. Un tel

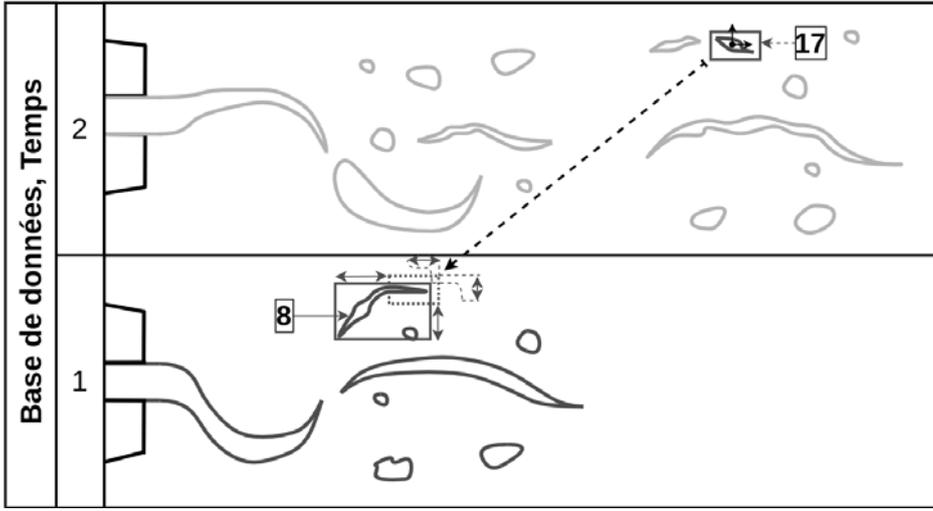


FIGURE 12.15. – Création d'un lien d'affiliation.

exemple est visible Figure 12.15 avec la structure 8 qui est le parent de la 17. Cette création des liens d'affiliation revient à déterminer les parents de chacune des structures issues de la nouvelle base de données ordonnée.

Les informations nécessaires à la détermination des parents, issues de la nouvelle base de données ordonnée, sont résumées ci-dessous :

$$\vec{l}(i, t) = \begin{pmatrix} l_x(i, t) \\ l_y(i, t) \\ l_z(i, t) \end{pmatrix} \quad \vec{Pos}_{max}(i, t) = \begin{pmatrix} x_{max}(i, t) \\ y_{max}(i, t) \\ z_{max}(i, t) \end{pmatrix} \quad \vec{U}_{cg}(i, t) = \begin{pmatrix} u_{cg}(i, t) \\ v_{cg}(i, t) \\ w_{cg}(i, t) \end{pmatrix}$$

$$\vec{Pos}_{min}(i, t) = \vec{Pos}_{max}(i, t) - \vec{l}(i, t)$$

Ainsi, i désigne un des amas reconstruits et t un instant inclus dans son intervalle d'existence, $t_{deb} \leq t \leq t_{fin}$, Figure 12.15.

L'enveloppe d'une structure est déterminée grâce aux vecteurs \vec{l} , \vec{Pos}_{max} et \vec{Pos}_{min} qui représentent respectivement la longueur ainsi que les coordonnées maximales et minimales de cet amas dans chaque direction.

Un potentiel parent j de l'amas i doit respecter plusieurs critères. Le premier concerne son existence à l'instant précédent la génération de l'amas i , équation (12.18).

$$t_{deb}(j) \leq t_{deb}(i) - \Delta t \leq t_{fin}(j) \quad (12.18)$$

Le second implique que son enveloppe, à l'instant précédent la génération de l'amas i , contienne l'estimation de la position du centre de gravité de l'amas i , équation (12.19). Ce critère assure que l'amas i provient d'une zone proche de celle de l'amas j .

$$\vec{Pos}_{min}(j, t_{deb} - \Delta t) \leq \vec{Pos}_{cg}(i, t_{deb}) - \vec{U}_{cg}(i, t_{deb})\Delta t \leq \vec{Pos}_{max}(j, t_{deb} - \Delta t) \quad (12.19)$$

Ces deux critères restreignent la liste des parents potentiels. Suite à cela, les écarts d'enveloppes dans chaque direction sont estimés à l'instant précédent la génération de l'amas i .

$$\vec{\epsilon}_{max}(i, j) = \begin{pmatrix} \epsilon_{x \ max}(i, j) \\ \epsilon_{y \ max}(i, j) \\ \epsilon_{z \ max}(i, j) \end{pmatrix} = \vec{Pos}_{max}(i, t_{deb}) - \vec{U}_{cg}(i, t_{deb})\Delta t - \vec{Pos}_{max}(j, t_{deb} - \Delta t) \quad (12.20)$$

$$\vec{\epsilon}_{min}(i, j) = \begin{pmatrix} \epsilon_{x \min}(i, j) \\ \epsilon_{y \min}(i, j) \\ \epsilon_{z \min}(i, j) \end{pmatrix} = \vec{Pos}_{min}(i, t_{deb}) - \vec{U}_{cg}(i, t_{deb})\Delta t - \vec{Pos}_{min}(j, t_{deb} - \Delta t) \quad (12.21)$$

De grands écarts illustrent que certaines faces sont éloignées mais n'impliquent pas forcément la réjection du candidat. La proximité de quelques faces suffit à garantir que le candidat soit un parent cohérent pour l'amas i . Toutefois, plusieurs candidats peuvent respecter les critères précédemment cités, c'est pourquoi le choix final s'effectue en maximisant la somme des inverses de ces écarts, équation (12.22).

$$\max \left(\frac{1}{\epsilon_{x \max}(i, j)} + \frac{1}{\epsilon_{y \max}(i, j)} + \frac{1}{\epsilon_{z \max}(i, j)} + \frac{1}{\epsilon_{x \min}(i, j)} + \frac{1}{\epsilon_{y \min}(i, j)} + \frac{1}{\epsilon_{z \min}(i, j)} \right) \quad (12.22)$$

Grâce à cela, chaque structure de cette nouvelle base de données est enrichi par la connaissance de son parent, Figure 12.16.

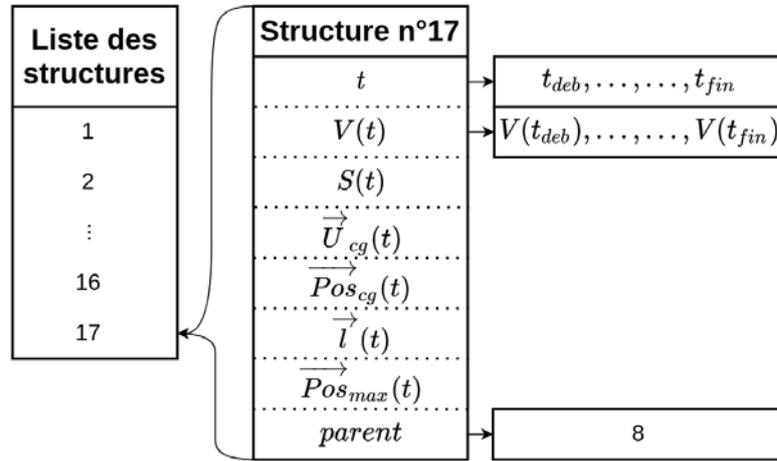


FIGURE 12.16. – Actualisation de la base de données ordonnée avec les parents correspondants.

12.7.3. Catégorisation des amas

Cette nouvelle base de données ordonnée recueille l'ensemble des amas reconstruits par cette méthode de suivi par approximation point particule. Ces amas regroupent dans leur propre structure de données des informations dynamiques et topologiques permettant de les catégoriser durant leur durée d'existence. Ainsi, un amas peut changer de catégorie durant son existence en fonction de ses changements de topologies.

Une première catégorisation a été réalisée dans la section 12.7.1, au-travers de la mise en place du suivi. En effet, ce dernier ne reconstruit des amas que de même type, c'est-à-dire, étant soit strictement à l'intérieur du domaine (désigné Interne) soit avec un côté commun avec ce dernier (désigné Bord). Les amas ayant au moins un bord en commun avec le domaine sont donc classifiés dans leur propre catégorie, Bord. Les restants, Interne, sont classifiés en fonction de leurs topologies, Goutte, Ligament et Autre, Figure 12.17.

Une catégorie, $Cat(t)$, est associée pour chaque instant d'existence d'un amas. Pour déterminer cette dernière à chaque instant d'existence, les critères de classification (β , γ et ξ) décrits section 5.4 sont ré-employés avec les seuils listés Table 5.1.

Les amas n'étant pas classifiés en tant que Goutte ou Ligament sont tous affectés dans la dernière catégorie Autre. Cette nouvelle information est sauvegardée dans la structure de données de chaque amas sous le nom de Cat , Figure 12.18.

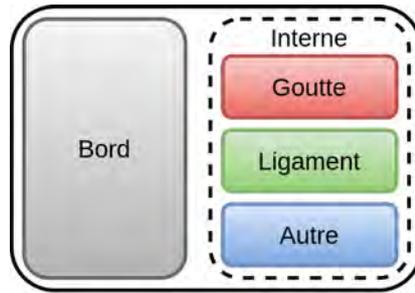


FIGURE 12.17. – Catégories possibles pour les amas.

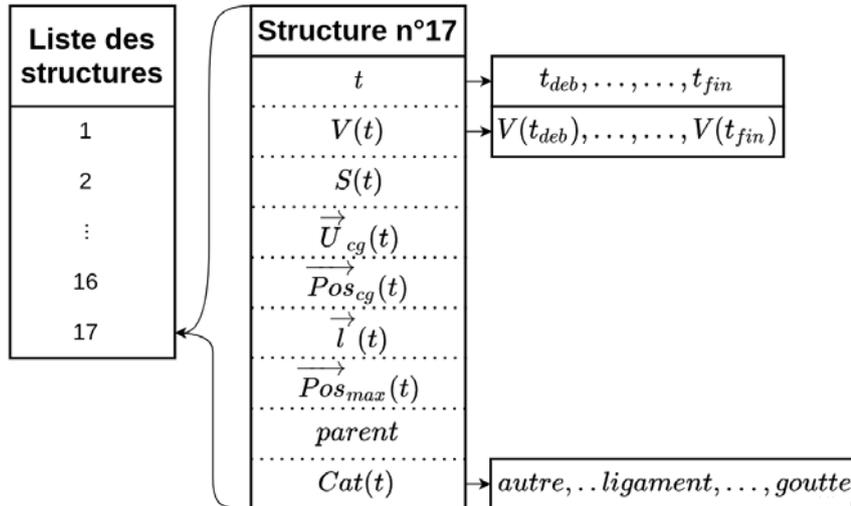


FIGURE 12.18. – Actualisation de la base de données ordonnée avec les catégories correspondantes.

Un exemple d’une telle classification est visible Figure 12.19. Les amas dont l’enveloppe coïncide avec le domaine de simulation, dans la catégorie Bord, ont une enveloppe en gris. Les restants, Interne, étant strictement dans le domaine de simulation sont regroupés en Autre, Ligaments et Gouttes pour une enveloppe respectivement de couleur bleue, verte et rouge.

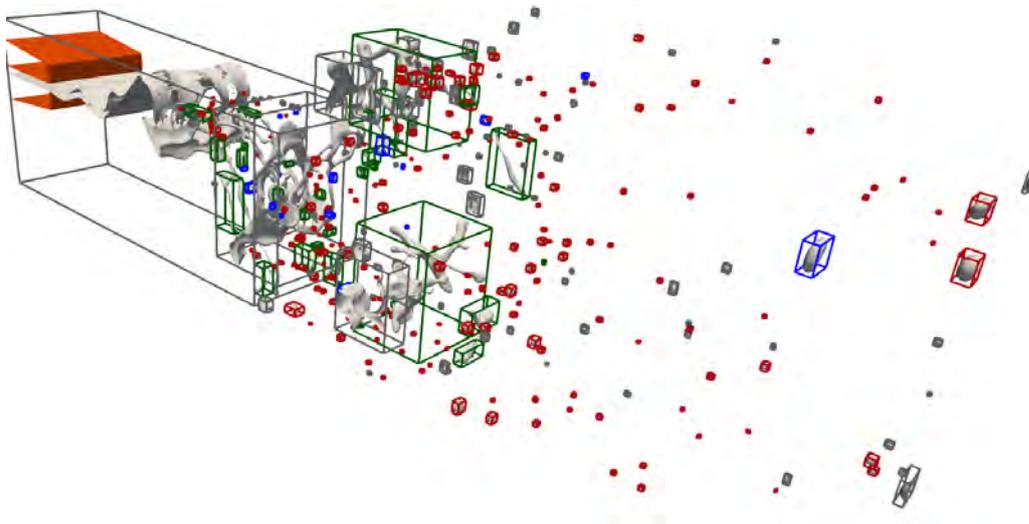


FIGURE 12.19. – Structures liquides catégorisées durant l’atomisation d’une nappe liquide.

12.7.4. Identification et séparation des paquets

La nouvelle base de données ordonnée permet de suivre toutes les structures liquides de la simulation et de connaître les amas les ayant générés.

L'identification et la séparation des paquets reposent sur l'évolution du volume de la nappe, Figure 12.20. Chacune des pertes soudaines de volume correspond au détachement d'un paquet liquide, tel que à $t = 5.6$ ms Figures 12.20 et 12.22.

De manière plus générale, ces ruptures sont causées par les oscillations de la nappe et donc par les longueurs d'onde qui s'y déploient, Figure 12.21. Par exemple, le développement de la grande longueur d'onde détectée à $t = 14.5$ ms Figure 12.22 mène au détachement d'un volumineux paquet à $t = 16$ ms Figure 12.20. Les longueurs d'onde générées sur la nappe influencent le volume des paquets générés. Les plus importantes précèdent le détachement des plus volumineux paquets.

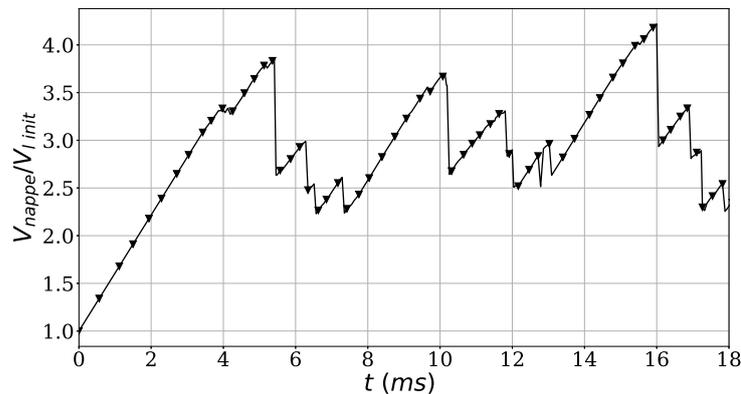


FIGURE 12.20. – Évolution du volume de la nappe.

Un offset temporel est présent entre le détachement du paquet et la détection de la longueur génératrice. Cela provient de la phase de développement des longueurs d'ondes dont l'amplitude s'accroît jusqu'à la rupture de la nappe. De plus, cette phase de développement n'est pas constante puisque les plus grandes longueurs d'ondes nécessitent une durée, jusqu'à la rupture, supérieure.

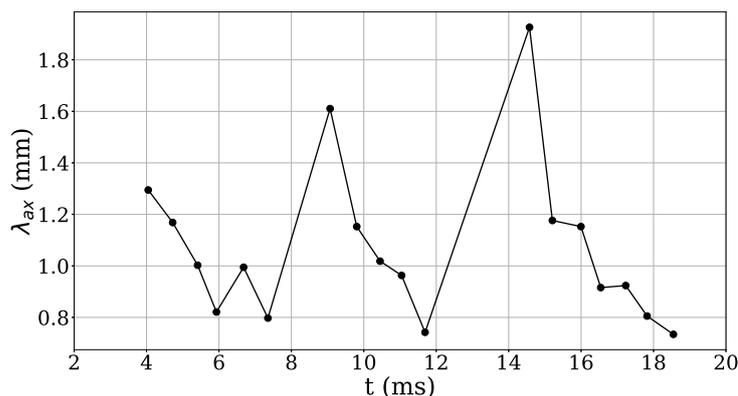


FIGURE 12.21. – Longueurs d'ondes axiales de la nappe.

Chaque quantité de liquide qui se détache de la nappe débitante est donc un nouveau paquet dont les évolutions doivent être suivies temporellement.

Pour réaliser cela, une balise supplémentaire est affectée à toutes les structures de la base de données ordonnée et représente le numéro du paquet auquel ces dernières sont assignées.

L'étape suivante est de définir un intervalle de temps dans lequel tous les nouveaux amas générés sont assignés à un paquet (via la valeur de la balise). Cette durée d'affectation à un

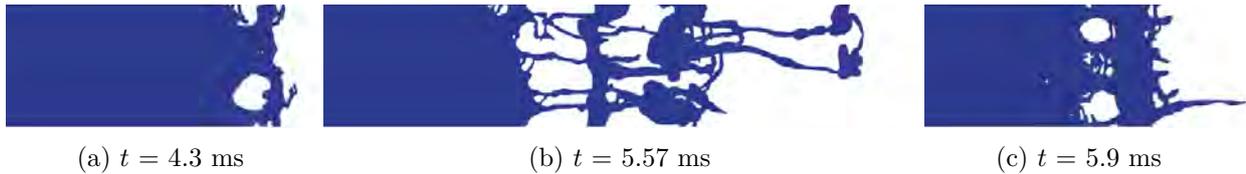


FIGURE 12.22. – Vues de dessus de la nappe.

paquet donné n'est défini qu'entre deux discontinuités consécutives de la nappe. Ainsi toutes les structures créées dans ces intervalles sont affectées à un paquet différent.

12.8. Caractérisation temporelle du processus d'atomisation

Cette nouvelle décomposition permet de suivre les évolutions des propriétés de chacun des paquets liquides émis ainsi que des structures qui les composent. En s'appuyant sur la catégorisation des structures liquides, section 12.7.3, les points suivants ont été analysés :

- Caractérisation générale des paquets.
- Présence des ligaments par paquet.
- Caractéristiques des gouttes par paquet.

12.8.1. Caractérisation générale des paquets

Le premier point d'analyse concerne le volume liquide affecté à chaque paquet (V_{paquet}) adimensionné par celui d'initialisation de la nappe ($V_{l\ init}$, équation (7.6)). Hormis le premier paquet émis lors du premier cycle, la génération des suivants suit un schéma répétitif. Ce dernier commence par la génération d'un volumineux paquet, associé au développement d'une grande longueur d'onde, qui se différencie des suivants par son volume quasiment trois fois plus important. Suivent de plus petits paquets, issus de plus petites longueurs d'ondes, qui sont plus nombreux par cycles (entre 3 et 4) et possèdent un volume analogue. Ce schéma de génération de paquet se répète au cours du temps et peut donc être associé à des cycles, dont les premiers sont représentés, Figure 12.23.

Le premier cycle se différencie des suivants par la détection d'un paquet supplémentaire peu volumineux. Ce dernier est associé à l'initialisation arbitraire en volume de la nappe débitante et du processus d'atomisation, Figure 7.4 équation (7.6).

Les courbes d'évolution du volume des paquets possèdent toutes des phases similaires. Tout d'abord, une brusque augmentation de volume signifie un détachement de liquide de la nappe débitante et son affectation à un paquet. Suite à cela, cette quantité de liquide est advectée par l'écoulement gazeux, illustré par la valeur constante du volume associé. Enfin, ce volume finit par atteindre les limites du domaine et décroît à cause de la sortie du liquide du domaine. Cette dernière étape est désignée par la suite comme la phase de décroissance.

Le volume maximal d'un paquet influence sa phase de décroissance, de sortie du liquide du domaine.

Des paquets volumineux impliquent la présence de larges structures liquides qui, dans cette configuration, possèdent des temps caractéristiques de rupture importants. Cela est induit par la présence rapprochée des parois latérales et de leurs conditions limites de glissement. Le liquide en contact ne fait que glisser le long de ces parois et la structure liquide associée est ainsi globalement moins perturbée par l'écoulement gazeux, Figure 12.5. Cela entraîne un rallongement de leur temps caractéristique de rupture qui peut devenir supérieur au temps total d'advection. De plus, ces larges structures possèdent une inertie supérieure en comparaison des plus petites, générées

durant le détachement de la nappe ou pendant l'atomisation dans le domaine. Ceci signifie que les plus volumineuses structures sont distancées par les plus petites se déplaçant plus rapidement. Cela se traduit par un rallongement des phases de décroissance.

À l'opposé, les paquets les moins volumineux, associés aux plus petites longueurs d'ondes, possèdent de plus petites structures liquides qui, à leur tour, ont un temps caractéristique de rupture raccourci. Cela réduit les potentiels décalages entre les grandes et petites structures liquides, au sein du même paquet, les faisant sortir en même temps. Cela explique le raccourcissement de leurs phases de décroissance.

Enfin, de brusques variations de volume peuvent apparaître lors de l'advection des paquets liquides et illustrent la coalescence de structures entre différents paquets. Un tel exemple est visible Figure 12.23 durant le troisième cycle entre le paquet 1 et 2. Ces coalescences ont plus de probabilités d'apparaître entre deux paquets successifs issus de longueurs d'ondes de tailles très différentes. Une grande longueur d'onde génère de larges structures ayant une grande inertie (relativement lente) tandis que les petites longueurs d'ondes en créent avec de plus faibles (relativement rapide). Ainsi les plus rapides structures rattrapent et impactent les plus lentes (plus larges) durant l'advection dans le domaine.

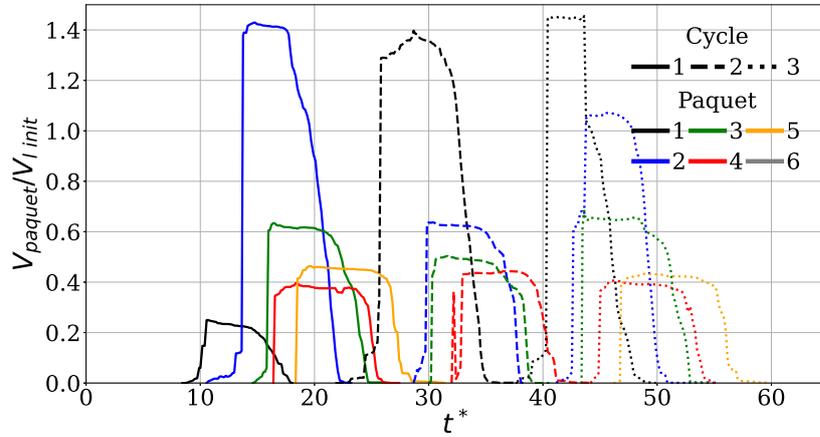


FIGURE 12.23. – Volume liquide des paquets, cas de référence.

Une erreur de volume, ϵ_v , est construite afin de s'assurer qu'aucune structure liquide n'est oubliée par cette méthodologie d'affectation de volume par paquet. Cette dernière repose sur le volume liquide total issu de la base de données désordonnée, $V_{l\ tot}$, sur le volume de la nappe débitante, V_{nappe} , et le volume de chacun des paquets liquides construits, V_{paquet} , équation (12.23)

$$\epsilon_v = \max \left(\left| V_{l\ tot}(t) - V_{nappe}(t) - \sum_{i=1}^{n_{paquet}} V_{paquet}(i, t) \right| \right) \quad (12.23)$$

La valeur de cette erreur de volume est normalisée arbitrairement par rapport au volume de la maille Δ^3 ainsi qu'au volume d'initialisation de la nappe, $V_{l\ init}$, Table 12.7. Cette dernière démontre que la portion de liquide qui n'est pas prise en compte par ce suivi par paquet est négligeable. Cette méthodologie de suivi de liquide et d'affectation par paquet permet de suivre distinctement et de manière conservative les volumes associés à plusieurs longueurs d'ondes d'émission.

ϵ_v	ϵ_v/Δ^3	$\epsilon_v/V_{l\ init}$
$\approx 10^{-11}$	861	$6 \cdot 10^{-3}$

TABLE 12.7. – Maximum d'erreur de volume par le suivi par paquet.

Les évolutions de surface liquide de chacun des paquets permettent de constater l'avancement des processus d'atomisation durant leurs advections, Figure 12.24. En effet durant cette phase,

à volume constant, la surface associée à chaque paquet décroît bien avant que ses structures ne sortent du domaine. Cela signifie que les structures ayant les topologies les plus complexes se rompent en ligaments puis en gouttes. Cette phase de décroissance de surface est analogue à celle présente dans les études périodiques, qualifiée de stabilisation du spray.

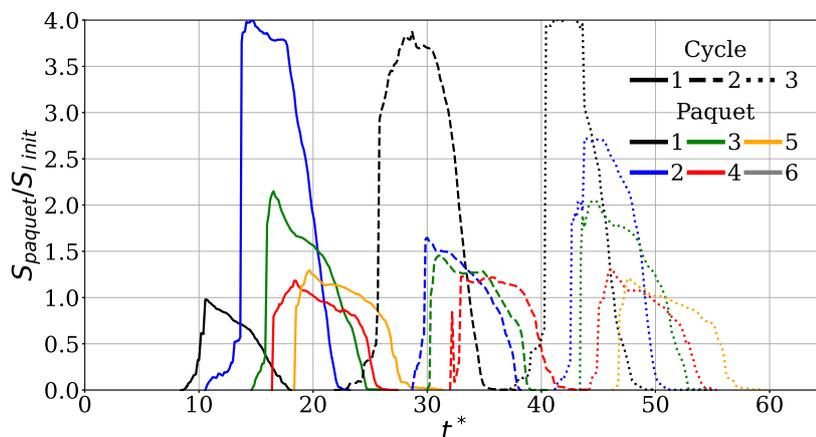


FIGURE 12.24. – Surface liquide des paquets, cas de référence.

Pour simplifier les notations, le volume associé à chacun des paquets, V_{paquet} , est employé comme une grandeur de normalisation. Ainsi, dans la suite de ce chapitre, ce terme ne désigne plus la quantité temporelle du volume du paquet (variant en fonction de l'advection dans le domaine) mais désormais une constante représentant l'intégralité, le maximum, du volume de ce même paquet. Une analyse complémentaire a été réalisée sur deux paquets particuliers pour mieux comprendre leur processus d'atomisation respectif dans l'annexe C.1.

12.8.2. Présence des ligaments

Le volume des ligaments par paquet, V_{lig} , est normalisé par le volume maximal associé au paquet, V_{paquet} , Figure 12.25. Ce dernier est plus difficile à interpréter car ces valeurs dépendent de la rupture de nappe qui engendre le paquet. Bien souvent cette cassure est de type membrane avec la formation de volumineux ligaments, Figures 12.5c et 12.5d. Cette configuration correspond à un important volume de ligament détecté proche de l'instant de séparation du paquet de la nappe. Cependant, d'autres cas de figures de rupture existent, tel que la rupture totale dans la direction transverse, Figures 12.5e et 12.5f. Ce type de détachement produit quelques petits ligaments ainsi que de volumineuses structures liquides aux topologies diverses. Ces dernières se fragmentent en ligaments bien plus tardivement durant leurs advections en aval du domaine et décalent donc la détection de maximum en volume.

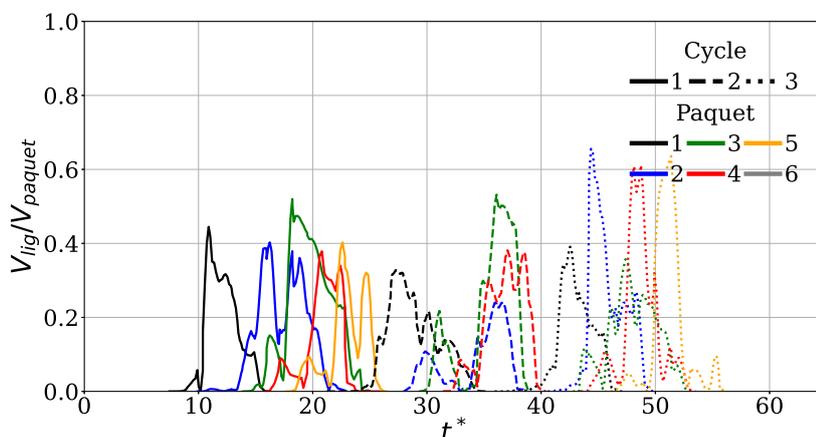


FIGURE 12.25. – Volume des ligaments par paquet, cas de référence.

Les évolutions du nombre de ligaments ne semblent dépendre que du volume maximal du paquet détaché ainsi que du type de rupture qui y l'a créé, Figure 12.26. Plus un paquet est volumineux plus le nombre de ligaments que ce dernier peut engendrer est grand. À cela s'ajoute le type de rupture initiale qui favorise une première génération de ligament.

Bien que les maximums en volume puissent être retardés par le type de rupture, les maximums en nombre restent proches des instants de détachement des paquets, Figure 12.25.

Toutes ces remarques laissent penser qu'une longueur d'onde génératrice de paquet conditionne le volume de ce dernier ainsi que son futur nombre de ligaments.

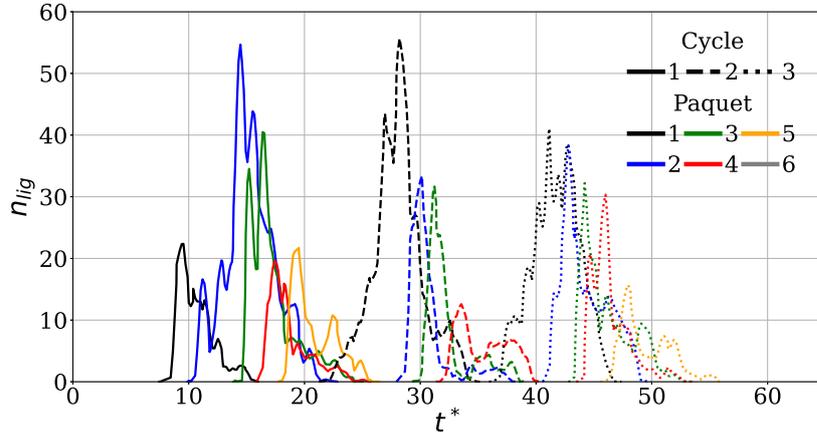


FIGURE 12.26. – Nombre de ligaments par paquet, cas de référence.

12.8.3. Caractérisation des gouttes

Le taux d'atomisation instantanée d'un paquet représente la quantité de gouttes (issues d'un paquet) à l'instant t^* dans le domaine. Cette grandeur est estimée par le volume de gouttes instantanées V_{gt} adimensionné par le volume maximal du paquet, V_{paquet} , Figure 12.27. Ces derniers sont croissants, atteignent des maximums compris entre 20 % et 70 % puis déclinent jusqu'à la sortie complète du liquide.

Les maximums atteints les plus importants sont associés à des petites longueurs d'ondes génératrices, soit un faible volume maximal de paquets. Un volume détaché plus faible induit un temps de rupture réduit et ainsi maximise le taux d'atomisation détectée.

À l'inverse un volumineux paquet peut générer une multitude de structures (volumineuses ou non) qui n'atteignent pas l'état topologique de goutte au même instant. Les structures les moins volumineuses sont rapidement converties en gouttes et advectées en sortie du domaine. À l'opposé, deux scénarii sont possibles pour les plus larges. Le premier considère que ces structures n'atteignent pas la forme de goutte à cause de leur temps caractéristique de ruptures potentiellement supérieur à la durée d'advection totale. Le second considère la fragmentation et la conversion en goutte possible mais cela n'intervient que tardivement dans le domaine.

Toutes ces potentielles configurations de fragmentation signifient que les maximums des taux d'atomisations instantanées ne prennent pas en compte la totalité du volume converti en gouttes.

Le nombre de gouttes instantanées par paquet confirme la sortie prématurée des plus petites gouttes puisque les maximums en nombre se manifestent avant ceux des taux d'atomisation, Figures 12.27 et 12.28. La décroissance du nombre de gouttes durant l'augmentation des taux d'atomisation reflètent que le spray généré est majoritairement composé de petites gouttes. De plus, cette chute du nombre de gouttes illustre que l'atomisation des structures liquides ne compense pas, en nombre, la sortie des plus petites. Les gouttes générées sont plus volumineuses, puisque les taux d'atomisation augmentent, mais moins nombreuses, comparées à celles déjà sorties.

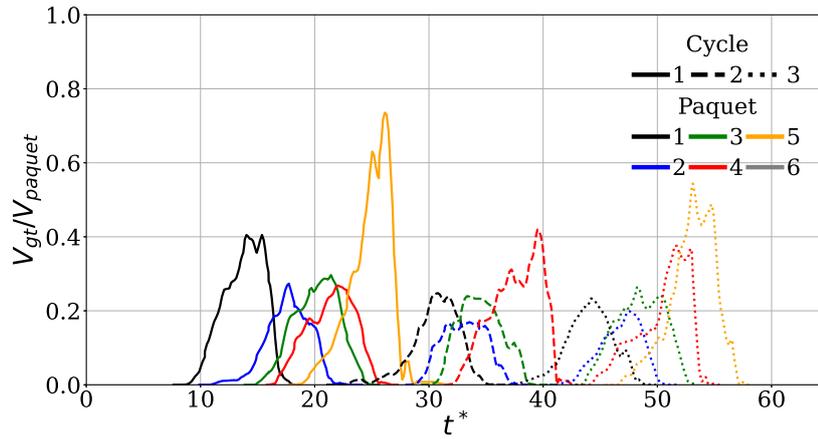


FIGURE 12.27. – Volume des gouttes par paquet, cas de référence.

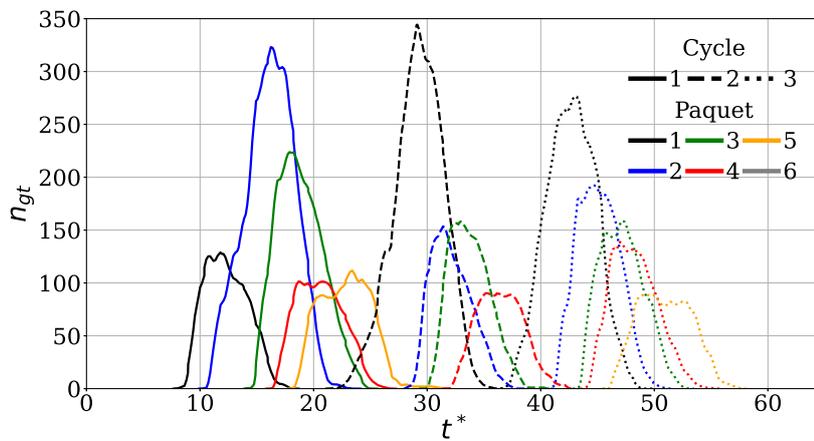


FIGURE 12.28. – Nombre des gouttes par paquet, cas de référence.

Un diamètre de Sauter instantané est estimé à partir des gouttes présentes dans le domaine, Figure 12.29. Ce dernier, bien qu'ayant de grandes fluctuations lorsque les taux d'atomisation varient brutalement, évolue de manière quasi-linéaire. De plus, bien qu'ayant des maximums de taux d'atomisation différents, les pentes de ce diamètre caractéristique sont très proches pour chaque paquet. Cela signifie que les processus d'atomisation de chacun des paquets produisent des gouttes ayant un rapport volume sur surface analogue, indépendamment de leur taux d'atomisation maximal.

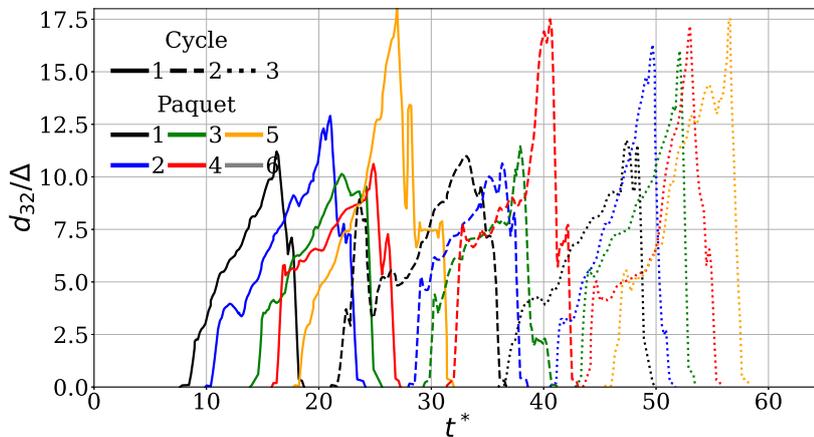


FIGURE 12.29. – Diamètre de Sauter par paquet, cas de référence.

12.9. Analyse des gouttes sortantes

La différence d'inertie des structures générées par paquet crée des advections plus ou moins rapides qui, à leur tour, impactent le taux d'atomisation instantané mesurable dans le domaine. Pour améliorer les analyses statistiques sur chaque paquet liquide, et éviter de négliger les gouttes sorties du domaine, celles-ci peuvent être sauvegardées puis comptabilisées pour ajuster les mesures des propriétés liées à chaque paquet. Cette méthodologie reste valable si ces gouttes, lors de leurs sorties, sont stables et ne sont pas sujettes à une atomisation secondaire.

12.9.1. Détection de sortie des gouttes

Plusieurs conditions doivent être respectées pour qu'une goutte interne soit qualifiée de sortante. La première repose sur les dimensions minimales et maximales du domaine qui sont rassemblées dans les vecteurs $\vec{Pos}_{dom\ min}$ et $\vec{Pos}_{dom\ max}$, équation (12.6).

Ainsi, un amas i commence à sortir du domaine entre l'instant t_{fin} et $t_{fin} + \Delta t$ si au moins une des composantes des deux vecteurs ci-dessous est positive.

$$\begin{cases} \vec{Pos}_{max}(i, t_{fin}) + \vec{U}_{cg}(i, t_{fin})\Delta t - \vec{Pos}_{dom\ max} \\ - (\vec{Pos}_{min}(i, t_{fin}) + \vec{U}_{cg}(i, t_{fin})\Delta t) - \vec{Pos}_{dom\ min} \end{cases}$$

De plus, les amas qui respectent cette condition doivent être associés à la catégorie goutte lors de leur dernier instant d'existence, équation (12.24).

$$Cat(t_{fin}) = goutte \quad (12.24)$$

Ainsi les gouttes qui ne respectent pas les conditions listées ci-dessus, ne sont pas considérées comme sortantes du domaine de simulation. Ces dernières peuvent être associées à des gouttes temporaires, détruites durant le processus d'atomisation par des collisions liquides avec d'autres amas.

12.9.2. Définition d'un Weber inspiré des mesures expérimentales

Pour établir si les gouttes sortantes sont sujettes à une atomisation secondaire, une définition de Weber a été construite en s'inspirant des expériences de Pilch and Erdman [135].

Ces derniers utilisent les conditions à l'infini amont, U_g et U_l , pour déterminer un Weber qui illustre, ou non, l'atomisation secondaire des gouttes émises. Cette vitesse gaz expérimentale, à l'infini amont, peut être assimilée à la vitesse gaz reconstruite au centre de gravité de la goutte, si cette dernière n'était pas présente.

Ainsi un Weber, qui se rapproche de ces mesures expérimentales, We_{exp} , est défini ci-dessous, équation (12.25).

$$We_{exp}(i, t) = \frac{\rho_g \left\| \vec{U}_{g\ @, cg}(i, t) - \vec{U}_{gt\ cg}(i, t) \right\|^2 d_{gt}(i, t)}{\sigma} \quad (12.25)$$

Avec $\vec{U}_{g\ @, cg}$ la vitesse gaz inconnue au centre de gravité de la goutte si cette dernière n'était pas présente et $\vec{U}_{gt\ cg}$ sa vitesse au centre de gravité.

12.9.3. Reconstruction de la vitesse gaz au centre de gravité d'une goutte

L'estimation de la vitesse gaz reconstruite à la position du centre de gravité d'une goutte sortante $\vec{U}_{g\ @, cg}$, repose sur un bilan des forces s'exerçant sur cette dernière, à chaque instant. Ce bilan met en relation la force de traînée de la goutte avec son accélération, équation (12.26).

$$\rho_l V_{gt} \vec{d}_{gt\ cg} = \frac{\pi}{8} \rho_g C_D d_{gt}^2 \left\| \vec{U}_{g\ @, cg} - \vec{U}_{gt\ cg} \right\| \left(\vec{U}_{g\ @, cg} - \vec{U}_{gt\ cg} \right) \quad \text{avec} \quad \vec{d}_{gt\ cg} = \frac{d(\vec{U}_{gt\ cg})}{dt} \quad (12.26)$$

Afin de connaître le coefficient de traînée d'une goutte sortante, les travaux de Norde et al. [124], Villedieu et al. [176] et plus généralement de Ganser [62] sont réemployés. Ces derniers, dans leur contexte d'étude de particules de glace, estiment le coefficient de traînée, C_D , d'une de ces particules à partir de sa sphéricité, β .

Cette méthodologie est transposée dans cette étude avec un coefficient de traînée, équation (12.29), qui repose sur le calcul de coefficients, équation (12.27), sur l'estimation d'un Reynolds, équation (12.28), ainsi que sur les propriétés des gouttes sortantes, d_{gt} et β .

$$\begin{cases} A = \exp(2.3288 - 6.4581\beta + 2.4486\beta^2) \\ B = 0.0964 + 0.5565\beta \\ C = \exp(4.905 - 13.8944\beta + 18.4222\beta^2 - 10.2599\beta^3) \\ D = \exp(1.4681 + 12.2584\beta - 20.7322\beta^2 + 15.8855\beta^3) \end{cases} \quad (12.27)$$

$$Re = \frac{\rho_g \left\| \vec{U}_{g\ @, cg} - \vec{U}_{gt\ cg} \right\| d_{gt}}{\mu_g} \quad d_{gt} = 2 \left(\frac{3V_{gt}}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad \beta = \frac{4\pi \left(\frac{3V_{gt}}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}}}{S_{gt}} \quad (12.28)$$

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + ABRe) + \frac{C}{1 + \frac{1}{Re}} \quad (12.29)$$

Toutes ces quantités ne s'expriment qu'en fonction de la vitesse (connue) au centre de gravité de la goutte $\vec{U}_{gt\ cg}$ et de la vitesse gaz recherchée $\vec{U}_{g\ @, cg}$. Ainsi la détermination de cette dernière s'appuie sur une minimisation du système d'équation (12.26) avec pour inconnue le vecteur $\vec{U}_{g\ @, cg} - \vec{U}_{gt\ cg}$. Cette résolution et minimisation d'erreur est effectuée avec l'aide de la librairie Scipy de Python et de sa méthode "fsolve".

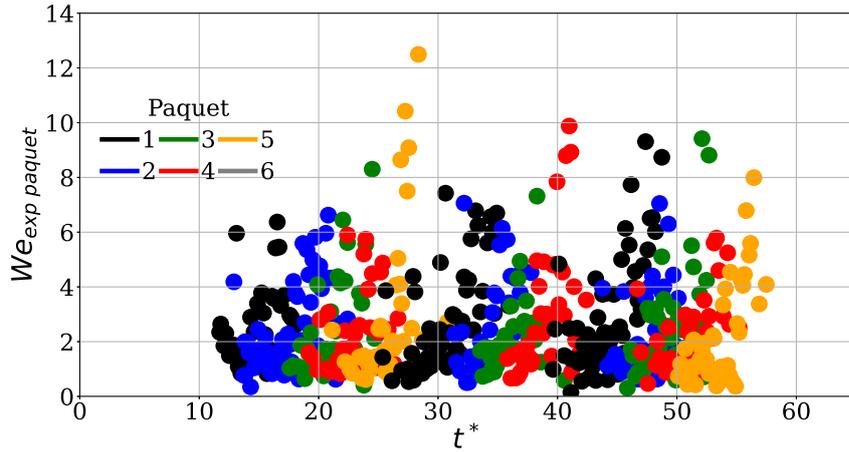
La connaissance au préalable de la vitesse $\vec{U}_{gt\ cg}$ ainsi que la récente estimation de $\vec{U}_{g\ @, cg} - \vec{U}_{gt\ cg}$ permet de retrouver la vitesse gaz recherchée $\vec{U}_{g\ @, cg}$. Grâce à cette dernière, la définition de Weber se rapprochant des mesures expérimentales, décrite équation (12.25), devient accessible.

12.9.4. Weber des gouttes sortantes

Ce Weber instantané $We_{exp}(i, t)$ est défini à chaque instant d'existence t de la goutte sortante i . Pour que cette mesure soit plus représentative des expériences, cette dernière est moyennée sur l'ensemble de sa durée d'existence, $t_{fin} - t_{deb}$. Ainsi chaque goutte possède un nouveau Weber qui n'est défini que pour sa durée d'existence, noté $We_{exp\ 2}(i)$.

Des gouttes appartenant à plusieurs paquets quittent le domaine numérique à chaque instant de la simulation. Pour cette raison, toutes celles appartenant au même paquet et sortant au même instant du domaine sont associées. La moyenne de leurs $We_{exp\ 2}(i)$ respectifs permet d'estimer plus globalement le comportement des gouttes sortantes de chaque paquet et à chaque instant. Cette nouvelle mesure est notée $We_{exp\ paquet}$ et se répète pour chaque instant de la simulation ainsi que pour chaque paquet.

Cette mesure $We_{exp\ paquet}$ résume l'état dynamique des gouttes sortantes à chaque instant et pour chaque paquet, Figure 12.30. Bien que certaines valeurs ponctuelles soient élevées, la majorité reste en-dessous de la valeur 12 caractérisant une potentielle atomisation secondaire.

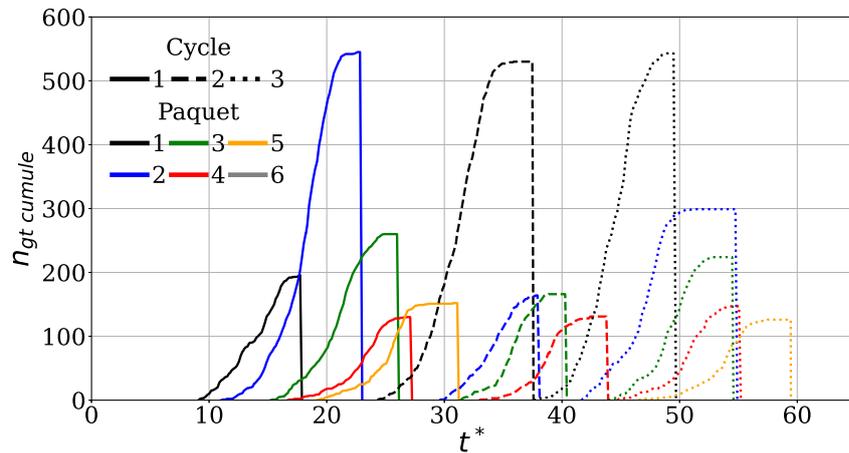

 FIGURE 12.30. – $We_{exp\ paquet}$ des gouttes sortantes du domaine, cas de référence.

12.9.5. Caractérisation des gouttes sortantes par paquet

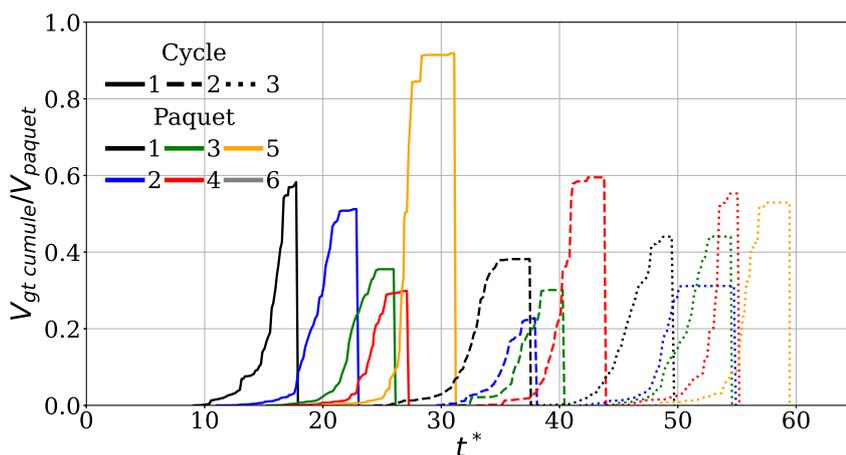
Les états dynamiques des gouttes sortantes assurent que leurs topologies sont stables, conservées, en quittant le domaine. La sauvegarde et l'utilisation de ces gouttes dans leurs états finaux permettent donc d'enrichir la caractérisation des processus d'atomisation de chaque paquet.

Ces gouttes sortantes sont cumulées, additionnées, au fur et à mesure de leurs sorties du domaine et sauvegardées durant le processus d'atomisation. Tous les indicateurs utilisant ces informations cumulées sont désignés avec l'indice $(.)_{cumule}$. Plus d'informations sur ces gouttes sortantes sont disponibles en annexe C.1, notamment sur les différents gains obtenus par cette méthode.

Tout d'abord le nombre de gouttes sortantes cumulées ne cesse de croître jusqu'à atteindre sa valeur maximale lors de la sortie de l'ensemble du liquide du paquet correspondant, Figure 12.31. Ce nombre stagne plus rapidement lorsque le volume maximal du paquet est faible. Autrement dit, les plus petits paquets produisent plus rapidement des gouttes qui, à leur tour, sortent plus rapidement du domaine.

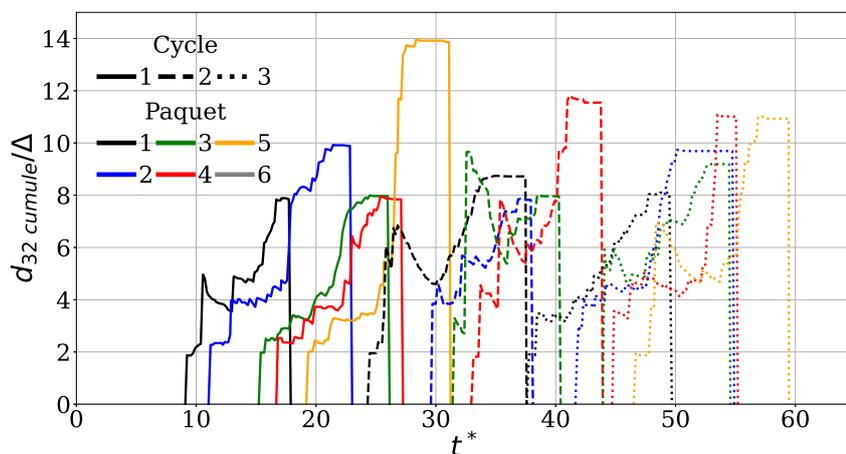

 FIGURE 12.31. – $n_{gt\ cumule}$ par paquet, cas de référence.

À la différence du taux d'atomisation instantanée interne, V_{gt}/V_{paquet} Figure 12.27, le taux d'atomisation basé sur le volume des gouttes sortantes, $V_{gt\ cumule}/V_{paquet}$ Figure 12.32, ne décroît pas. Les valeurs maximales sont atteintes en fin d'advection des paquets liquides, lorsque toutes les potentielles gouttes sont sorties du domaine.

FIGURE 12.32. – V_{gt_cumule} par paquet, cas de référence.

Le diamètre de Sauter est le dernier indicateur utilisé pour caractériser les gouttes sortantes, Figure 12.33. À la différence du calcul réalisé à partir des gouttes présentes en interne, Figure 12.29, les valeurs maximales atteintes sont plus petites. L'échantillon sur lequel se base l'estimation de ce diamètre est plus grand, en prenant en compte les gouttes sortantes, ce qui rend les valeurs atteintes plus précises.

Les évolutions du d_{32_cumule} sont moins oscillantes que celles du d_{32} , surtout en fin d'advection des paquets. Cela provient des sorties prématurées des quelques gouttes restantes du domaine qui font fortement varier le rapport volume sur surface, définissant ce diamètre caractéristique.

FIGURE 12.33. – d_{32_cumule} par paquet, cas de référence.

12.10. Comparaison avec l'expérience

Le suivi des structures liquides permet de reconstruire les évolutions des amas issus des détachements liquides successifs de la nappe. En recueillant, sauvegardant et analysant les gouttes produites par chacun de ces amas, une comparaison est possible avec les mesures de Dejean [45].

12.10.1. Moyenne par cycles

Une première estimation des quantités voulues est réalisée sur l'ensemble de chaque cycle. Pour cela, la première étape est de calculer la totalité du volume liquide qui s'est détaché de la nappe débitante durant un cycle, équation (12.30).

$$V_{l \text{ cycle}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{paquet cycle}}} \left(\frac{V_{\text{paquet}}}{V_{l \text{ init}}} \right) (i) V_{l \text{ init}} \quad (12.30)$$

Avec $n_{\text{paquet cycle}}$ le nombre de paquets par cycle. Le même raisonnement est appliqué au volume et à la surface des gouttes sortantes pour chaque cycle, équation (12.31).

$$\begin{aligned} V_{gt \text{ cumule, cycle}} &= \sum_{i=1}^{n_{\text{paquet cycle}}} \max(V_{gt \text{ cumule}}) (i) \\ S_{gt \text{ cumule, cycle}} &= \sum_{i=1}^{n_{\text{paquet cycle}}} \max(S_{gt \text{ cumule}}) (i) \end{aligned} \quad (12.31)$$

Enfin, pour chaque cycle, un diamètre de Sauter est estimé à partir des grandeurs précédentes, équation (12.32).

$$d_{32 \text{ cumule cycle}} = 6 \frac{V_{gt \text{ cumule, cycle}}}{S_{gt \text{ cumule, cycle}}} \quad (12.32)$$

Toutes ces quantités, obtenues pour chaque cycle, sont résumées Table 12.8. Les valeurs de volume liquide détaché par cycle, de taux d'atomisation atteint ainsi que les diamètres de Sauter qui y sont associés confirment un processus général d'atomisation répétitif. Pour rappel, Dejean [45] a mesuré, pour ce point de fonctionnement *MFR-We*, un diamètre de Sauter de 215 μm , soit $d_{32}/\Delta = 7.2$, Table 12.8.

Cycle (-)	$V_{l \text{ cycle}}/V_{l \text{ init}}$ (%)	$V_{gt \text{ cumule, cycle}}/V_{l \text{ cycle}}$ (%)	$d_{32 \text{ cumule cycle}}$ (μm)	$d_{32 \text{ cumule cycle}}/\Delta$ (-)	Écart relatif (%)
1	318	52	297	9.9	38
2	298	37	270	9.0	26
3	364	43	281	9.4	31

TABLE 12.8. – Recueil des données par cycle pour la comparaison avec l'expérience.

12.10.2. Moyenne sur l'ensemble de la simulation

Les mesures expérimentales s'effectuent sur des temps relativement longs par rapport à la simulation numérique. Pour cette raison, l'ensemble des données obtenues sur tous les cycles sont employées afin d'établir des mesures comparables avec l'expérience, équations (12.33) (12.34) et (12.35).

$$V_{l \text{ simu}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{cycle}}} (V_{l \text{ cycle}}) (i) \quad (12.33)$$

$$V_{gt \text{ cumule, simu}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{cycle}}} (V_{gt \text{ cumule, cycle}}) (i) \quad (12.34)$$

$$S_{gt \text{ cumule, simu}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{cycle}}} (S_{gt \text{ cumule, cycle}}) (i)$$

$$d_{32 \text{ cumule simu}} = 6 \frac{V_{gt \text{ cumule, simu}}}{S_{gt \text{ cumule, simu}}} \quad (12.35)$$

L'indice (*.simu*) désigne les grandeurs utilisées sur l'ensemble de la simulation pour réaliser la comparaison avec les résultats de Dejean [45], Table 12.9.

Un ensemble de paquets liquides, dont le volume total est équivalent à 10 fois celui de l'initialisation, se fragmente en atteignant un taux d'atomisation global de 44 %. Le spray formé par l'ensemble des gouttes émises au cours de la simulation possède un diamètre caractéristique de 284 μm qui est supérieur à la mesure expérimentale de Dejean [45] de 32 %.

$V_{l \text{ fin}}/V_{l \text{ init}}$ (%)	$V_{gt \text{ cumule, simu}}/V_{l \text{ simu}}$ (%)	$d_{32 \text{ cumule simu}}$ (μm)	$d_{32 \text{ cumule simu}}/\Delta$ (-)	Écart relatif (%)
980	44	284	9.5	32

TABLE 12.9. – Recueil des données de la simulation pour la comparaison avec l'expérience.

Plusieurs pistes peuvent expliquer cet écart de 32 %. La première concerne la trop faible quantité de liquide convertie en gouttes (44 %) qui ne permet pas d'atteindre exactement la mesure de référence. D'autre part, une trop faible résolution (choisie pour permettre une résolution temporelle suffisante) limite la précision des mesures de ce diamètre caractéristique ainsi que la détection des plus petites structures liquides.

12.11. Conclusion de l'étude du cas de référence

L'objectif de cette étude était de reproduire puis d'étudier un processus d'atomisation ligamentaire d'une nappe liquide dans un domaine réaliste.

Pour cela, une similitude par rapport aux expériences de Dejean [45] a été réalisée en conservant les nombres sans dimension jugés les plus pertinents. À partir de ces derniers, les conditions initiales du cas de référence furent établies permettant de réaliser la simulation.

Suite à cela, le domaine géométrique fut choisi en s'inspirant du banc expérimental SHAPE de l'ONERA.

L'étape suivante fut d'obtenir et de moyenniser les longueurs d'ondes se développant à la surface de la nappe liquide débitante afin établir une nouvelle échelle temporelle normalisée.

Ensuite, une observation qualitative du processus d'atomisation a été réalisée avec l'aide d'illustrations successives de l'interface. Ces dernières ont mis en évidence l'atomisation ligamentaire interne du liquide ainsi que la présence de cycle dans ce processus d'atomisation.

Pour caractériser quantitativement ce processus d'atomisation, les indicateurs globaux et locaux de l'étude périodique furent mesurés. Ces derniers, ont confirmé l'apparition de cycles de remplissage/vidage du domaine numérique mais démontré leurs limites pour une analyse plus poussée. En effet, la présence au sein du domaine de simulation de liquide ayant des avancements d'atomisation différents biaise ces indicateurs. Ces derniers ne peuvent différencier ces différents paquets liquides car leur construction repose sur le suivi et l'analyse de l'avancement du liquide dans sa globalité. En effet, dans les études périodiques, tout le liquide dans le domaine numérique est issu de la déstabilisation d'une seule longueur d'onde, d'un seul paquet liquide, ce qui n'est pas le cas dans cette nouvelle configuration d'étude.

Cette contrainte a été dépassée en construisant un suivi des amas liquides par longueur d'onde d'émission, soit par paquet généré. Cette méthodologie repose sur un suivi par approximation point particule des amas, affectés par la suite à des paquets en fonction de l'instant de leur apparition. Cette méthode permet de reconstruire les évolutions chronologiques des propriétés de chaque amas et d'établir des liens d'affiliation entre eux. Ainsi une classification supplémentaire de ces derniers est possible en goutte, ligament, autre et bord. Grâce à ce suivi, une caractérisation des processus d'atomisation de chacun des paquets est possible. Cette analyse a mis en évidence des sorties de gouttes, plus ou moins prématurées, qui peuvent pénaliser les taux d'atomisations instantanés de certains paquets.

Cette nouvelle limitation fut dépassée en recueillant et sauvegardant tous les amas qualifiés de gouttes sortantes. Des mesures de Weber furent établies sur ces dernières afin de s'assurer de

leurs conservations topologiques lors de la sortie du domaine. Suite à cela, une caractérisation complémentaire de ces gouttes sortantes est réalisée en comparant les différents indicateurs, paquet par paquet, avec les précédentes quantités maximales établies lors de l'atomisation. La prise en compte de ces gouttes sortantes est significative, donne de meilleurs résultats et permet de se comparer à l'expérience de manière plus cohérente.

Enfin, chaque cycle est caractérisé par la présence d'un premier paquet volumineux et de plusieurs de taille décroissante. Ces derniers présentent plusieurs différences, c'est pourquoi, une analyse complémentaire a été réalisée. Cette dernière emploie un indicateur en volume et en nombre, qui, à leur tour, est décomposé en fonction des catégories d'amas détectées durant le processus d'atomisation. Ainsi la proportion d'amas de type goutte, ligament, autre et bord est directement accessible et permet d'illustrer chacun de ces deux processus d'atomisation.

Influence des paramètres géométriques

Dans ce chapitre, l'influence de la résolution du maillage et de la taille longitudinale du domaine est investiguée sur un point de fonctionnement commun, celui de la simulation de référence. D'importants effets induits par les variations de ces paramètres sont attendus sur le processus d'atomisation.

Pour cela, une procédure d'analyse analogue à celle employée pour le cas de référence fut mise en place. Tout d'abord une description générale du comportement des nappes, suivie d'une analyse des processus d'atomisation au sein du domaine de simulation et, pour finir, une caractérisation des gouttes sortantes en vue d'une comparaison avec l'expérience. Tout ceci permet d'illustrer qualitativement les variations induites par ces paramètres géométriques sur les processus d'atomisation mais aussi sur le comportement de la nappe via ses oscillations et ses relevés de longueurs d'ondes. D'autre part, l'analyse des paquets liquides générés ainsi que la quantification des gouttes sortantes illustrent plus précisément l'influence de ces paramètres sur le processus d'atomisation.

Sommaire

13.1. Introduction	222
13.2. Géométrie et maillage	222
13.3. Longueurs d'ondes	223
13.4. Observations du déroulement de l'atomisation	224
13.5. Caractérisation des processus d'atomisation par paquet	226
13.5.1. Caractérisation générale des paquets	226
13.5.2. Présence des ligaments	227
13.5.3. Caractérisation des gouttes	228
13.6. Caractérisation des gouttes sortantes	229
13.7. Comparaison avec l'expérience	231
13.8. Conclusion sur l'influence des paramètres géométriques	232

13.1. Introduction

Le régime d'atomisation retenu est issu des nombres sans dimension de l'étude précédente du cas de référence, section 12.1, tout comme l'expression du temps caractéristique, équation (12.3) section 12.4.

13.2. Géométrie et maillage

Pour réaliser cette étude, deux nouvelles simulations sont comparées avec celle du cas de référence, chapitre 12.

La première conserve la taille de maille, Δ , ainsi que les dimensions verticales, L_y , et transverses, L_z , du cas de référence. Celle longitudinale, L_x , est agrandie tout en conservant la position minimale, $L_x \text{ min}$, liée à la position de l'injecteur. Ainsi cet allongement correspond à une augmentation de la position maximale du domaine dans la direction longitudinale, $L_x \text{ max}$, c'est-à-dire un surplus d'espace en aval du domaine pour permettre de suivre plus longtemps l'évolution des structures liquides.

La dernière simulation conserve toutes les dimensions du domaine géométrique du cas de référence, L_x , L_y et L_z section 12.2, mais emploie une taille de maille, Δ , deux fois plus petite. Cette dernière permettra de valider les résultats de la simulation de référence en termes de caractéristiques des plus larges échelles de l'écoulement et de mieux caractériser les plus petites.

Les domaines géométriques sont résumés ci-dessous dans la Table 13.1. Le premier domaine correspond au cas de référence, le deuxième à la simulation allongée et le troisième à la simulation plus précise.

L_x	L_y	L_z
34.56	34.56	3.84
42.24	34.56	3.84
34.56	34.56	3.84
mm	mm	mm

TABLE 13.1. – Domaines géométriques utilisés pour l'influence des paramètres géométriques.

Les maillages associés à ces différentes simulations sont résumés dans la Table 13.2.

L'allongement du domaine de 8 mm dans la direction longitudinale, pour une même taille de maille, est associé à un surplus significatif de 38 millions de points et 144 processus.

De l'autre côté, une multiplication par deux de la taille de maille, à domaine géométrique constant, entraîne un doublement des points et des processus dans chaque direction. Cela correspond à un surplus de 1189 millions de points et 4536 processus. Le coût d'une telle simulation ne permet pas d'obtenir un temps physique simulé aussi grand que celui du cas de référence, c'est pourquoi un seul premier cycle a pu être simulé.

np_x	np_y	np_z	np_{tot}	$nproc_x$	$nproc_y$	$nproc_z$	$nproc_{tot}$	α/Δ	Δ (μm)
1152	1152	128	$169.8 \cdot 10^6$	18	18	2	648	10	30
1408	1152	128	$207.6 \cdot 10^6$	22	18	2	792	10	30
2304	2304	256	$1358.9 \cdot 10^6$	36	36	4	5184	20	15

TABLE 13.2. – Maillages utilisés pour l'influence des paramètres géométriques.

13.3. Longueurs d'ondes

Les longueurs d'ondes se développant à la surface des nappes liquides débitantes ont été mesurées en employant la méthode décrite dans l'étude du cas de référence, section 12.3. Ces mesures, réalisées à partir d'images du profil de la nappe débitante, illustrent un procédé de génération de paquets par cycle analogue à celui constaté sur le cas de référence, Figure 13.1.

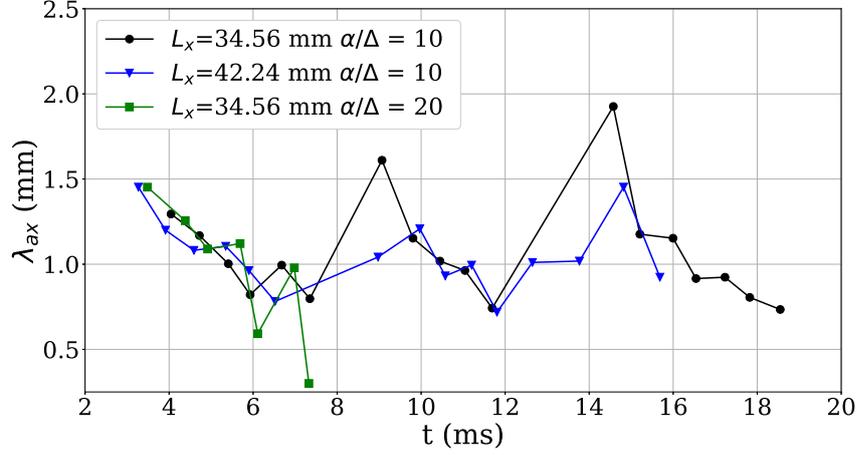


FIGURE 13.1. – Mesures de longueurs d'ondes longitudinales pour l'influence des paramètres géométriques.

Les valeurs moyennes déduites de ces relevés sont résumées dans la Table 13.3. Celles du cas de référence et du domaine allongé sont proches et démontrent qu'une extension de la direction longitudinale influence peu les longueurs d'ondes se développant à la surface de la nappe et plus généralement sa déstabilisation. La valeur moyenne associée à la simulation plus précise est plus faible à cause du temps physique simulé beaucoup plus restreint. Toutefois, durant leur laps de temps commun, son évolution est en accord avec les deux simulations précédentes, c'est pourquoi son comportement général est favorable à l'hypothèse que les grandes échelles sont correctement capturées avec le maillage de référence, moins raffiné.

L_x (mm) - α/Δ	34.56 - 10	42.24 - 10	34.56 - 20
$\langle \lambda_{ax} \rangle$ (mm)	1.07	1.06	0.97

TABLE 13.3. – Valeur moyenne des longueurs d'ondes longitudinales pour l'influence des paramètres géométriques.

Pour toutes ces raisons, la valeur moyenne de la longueur d'onde utilisée, dans cette étude, pour l'établissement du temps caractéristique est identique à celle du cas de référence :

$$\langle \lambda_{ax} \rangle = 1.07 \text{ mm} \quad (13.1)$$

13.4. Observations du déroulement de l'atomisation

Les similitudes comportementales entre ces trois simulations sont illustrées au moyen d'images de l'interface relevées à différents instants.¹

Les deux simulations utilisant la même taille de maille montrent des topologies très proches durant le processus d'atomisation. Les ruptures liquides se situent aux mêmes endroits, aux mêmes instants, tandis que le liquide détaché puis advecté en aval possède des topologies analogues, Figures 13.2a et 13.2b, 13.3a et 13.3b, 13.4a et 13.4b. Une première différence se distingue en fin de cycle avec un détachement de liquide se produisant plus tôt pour la simulation au domaine allongé, Figures 13.5a et 13.5b. Cela entraîne la génération d'un paquet supplémentaire, par rapport au cas de référence, qui doit être pris en compte, Figures 13.6a et 13.6b.

À l'opposé, la comparaison de l'interface du cas de référence et de la simulation plus précise illustre l'influence de la résolution sur le processus d'atomisation. Les oscillations de la nappe sont globalement correspondantes même si une plus fine taille de maille retarde localement les ruptures liquides, Figures 13.2a et 13.2c, 13.3a et 13.3c, 13.5a et 13.5c. Ces dernières se produisent lorsque l'épaisseur de la nappe est fine, proche d'une membrane. Sous l'action combinée de la tension de surface et de la taille de maille, le liquide se rompt lorsque son épaisseur devient inférieure à la résolution de la simulation. Ainsi une plus fine taille de maille retarde cette rupture, autrement dit rallonge ce temps caractéristique de rupture, Figures 13.4a et 13.4c, 13.6a et 13.6c.



(a) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 10$ (b) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 42.24 - 10$ (c) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 20$

FIGURE 13.2. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 9.3$, influence des paramètres géométriques.



(a) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 10$ (b) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 42.24 - 10$ (c) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 20$

FIGURE 13.3. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 11.9$, influence des paramètres géométriques.

1. La couleur bleue de l'interface de la plus fine simulation provient d'un comportement par défaut de Paraview. Certaines commandes Python sont parfois ignorées par d'anciennes versions de Paraview, présentes dans les centres de calcul.



(a) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 10$ (b) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 42.24 - 10$ (c) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 20$

FIGURE 13.4. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 14.3$, influence des paramètres géométriques.



(a) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 10$ (b) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 42.24 - 10$ (c) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 20$

FIGURE 13.5. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 16.7$, influence des paramètres géométriques.



(a) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 10$ (b) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 42.24 - 10$ (c) L_x (mm) - $\alpha/\Delta = 34.56 - 20$

FIGURE 13.6. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 19$, influence des paramètres géométriques.

13.5. Caractérisation des processus d'atomisation par paquet

Un seul cycle de génération de paquet a été conservé dans chacune des simulations, car la plus précise, $L_x = 34.56$ mm $\alpha/\Delta = 20$, n'a pas été poursuivie au-delà en raison du coût induit.

13.5.1. Caractérisation générale des paquets

Le premier indicateur, $V_{paquet}/V_{l\ init}$, illustre un processus de création de paquet peu influencé par l'allongement de la direction longitudinale ou l'augmentation de résolution, Figure 13.7.

Mise à part la présence d'un dernier paquet supplémentaire dans la simulation rallongée, la quantité de volume associée aux plus petits paquets ainsi que leur ordre d'apparition sont analogues avec le cas de référence. Toutefois, une différence de volume maximal atteint se distingue pour le plus volumineux paquet dans ces deux simulations et peut être à l'origine de la création du dernier paquet de la simulation rallongée.

Une diminution de la taille de maille permet de capturer un plus grand nombre de longueurs d'ondes et de manière plus précise. Toutefois, le même cycle de génération de paquets est observable. En effet, le premier paquet associé à l'initialisation de la nappe liquide est visible dans le cas de référence et la simulation raffinée. De plus, le plus volumineux paquet ainsi que les suivants, plus petits, représentant un cycle, sont eux aussi conservés.

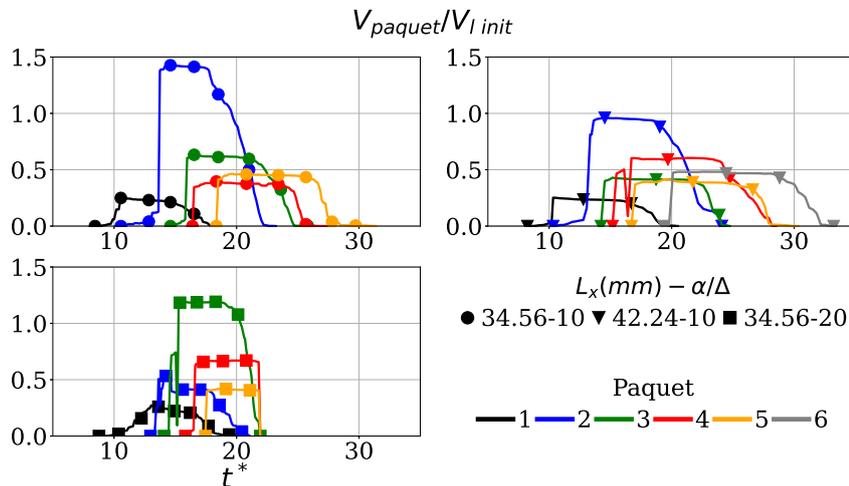


FIGURE 13.7. – Volume liquide des paquet, influence des paramètres géométriques.

Les évolutions de surface dans chacune de ces simulations illustrent des processus d'atomisations actifs qui convertissent, au fur et à mesure de leurs advections dans le domaine, les paquets liquides en structures ligamentaires puis en gouttes, Figure 13.8. Cette conversion se remarque lorsque la surface d'un paquet décroît alors que son volume associé reste constant (lors de son advection dans le domaine).

Un allongement de la longueur longitudinale augmente le temps caractéristique d'advection par rapport au cas de référence. Ce gain, pour une résolution conservée, implique une plus longue et donc une meilleure fragmentation des amas liquides. Cela se traduit par des décroissances de surfaces allongées à volume constant.

Une augmentation de résolution assure une mesure plus précise des surfaces des amas liquides associés à chaque paquet. Néanmoins, cette précision accru rallonge les temps caractéristiques de rupture et retarde l'ensemble du processus de fragmentation liquide. Cela se traduit par une diminution de surface des paquets moins brutale, avec des pentes négatives moins importantes.

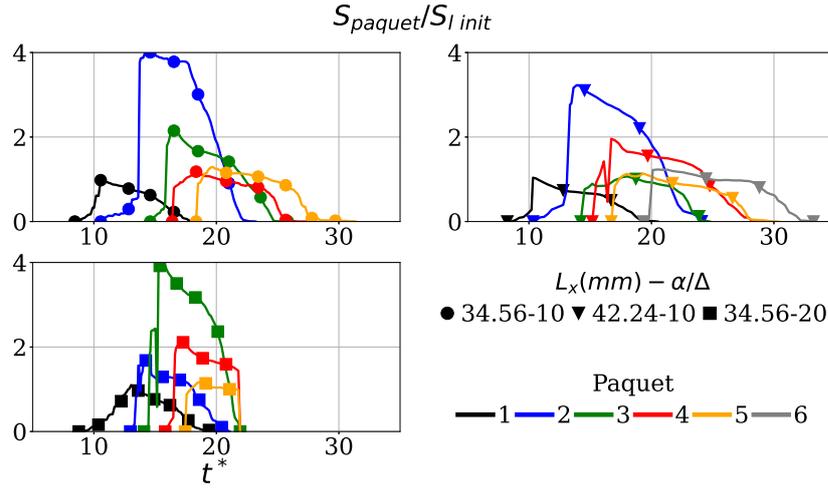


FIGURE 13.8. – Surface liquide des paquet, influence des paramètres géométriques.

Conformément à l'étude de référence, le terme V_{paquet} employé dans la suite de ce chapitre, ne désigne plus le volume d'un paquet variant en fonction du temps mais son intégralité, sa valeur maximale.

13.5.2. Présence des ligaments

Les évolutions ainsi que les maxima atteints par les volumes de ligaments démontrent que les processus d'atomisations restent ligamentaires, Figure 13.9.

Le cas de référence et la simulation rallongée possèdent des pourcentages de volumes des ligaments analogues.

A contrario, un nette baisse dans les maximums atteints se distingue dans la simulation affinée. Cet écart est provoqué par la diminution de la taille de maille qui, à son tour, induit un temps de rupture des structures liquides rallongé. Or, dans un domaine géométrique aux dimensions fixes, cela se traduit par une création tardive de ligaments. Ce phénomène peut induire la survie de structures complexes, ne satisfaisant pas les critères de classification de ligament, jusqu'à la sortie du domaine.

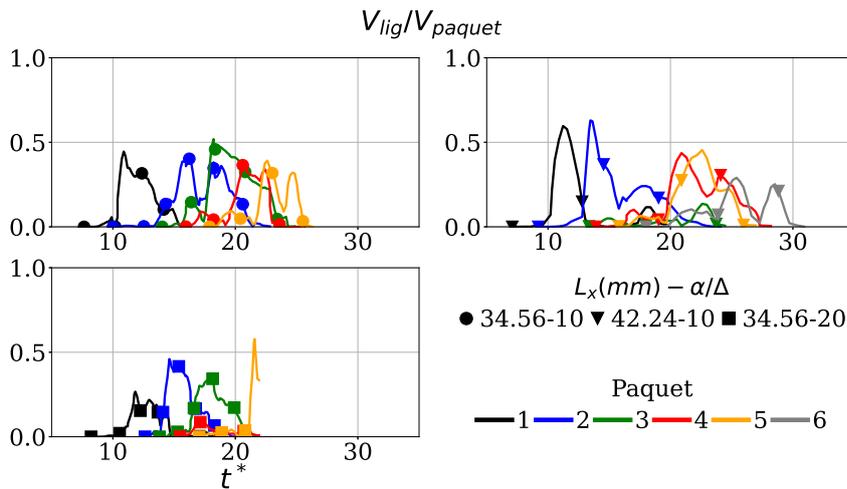


FIGURE 13.9. – Volume des ligaments par paquet, influence des paramètres géométriques.

Le nombre de ligaments est peu influencé par les variations de longueurs longitudinales, Figure 13.10. Pour un paquet similaire, tel que le premier, le pourcentage de volume ligamentaire ainsi que le nombre de ligaments sont analogues entre la simulation rallongée et le cas de référence.

Lorsque la résolution augmente, le nombre de ligaments reste du même ordre de grandeur

tandis que le volume associé se réduit. Cela signifie que l'accroissement de résolution favorise la génération de petites structures ligamentaires.

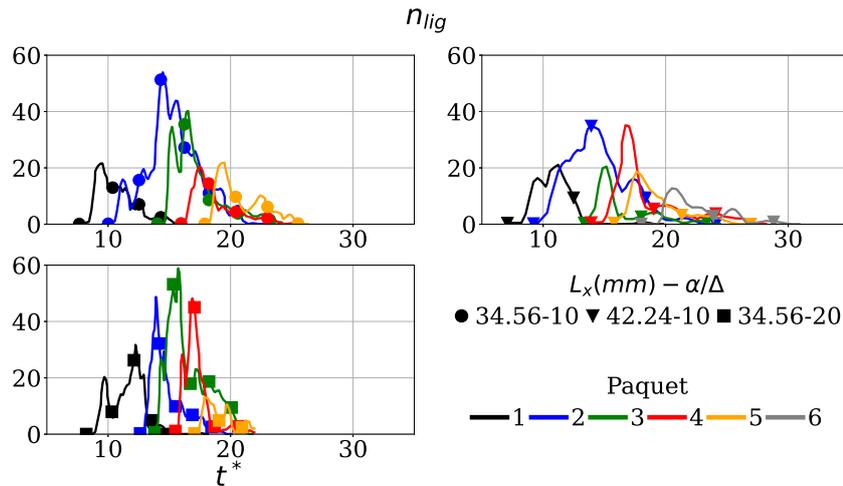


FIGURE 13.10. – Nombre des ligaments par paquet, influence des paramètres géométriques.

13.5.3. Caractérisation des gouttes

Une augmentation de la longueur longitudinale se traduit par des taux d'atomisation atteints (pourcentage de volume de gouttes) plus élevés, Figure 13.11.

À l'inverse, les valeurs maximales de la simulation la plus fine sont toutes inférieures ou égales au cas de référence. Cette baisse s'explique de la même manière que l'écart visible sur le volume des ligaments, Figure 13.9. L'augmentation de résolution accroît le temps caractéristique de formation des ligaments et d'autant plus celui des gouttes. Or, les dimensions du domaine étant fixes avec des conditions initiales constantes, le temps caractéristique d'advection des paquets liquides est conservé alors que celui des ruptures liquides s'agrandit jusqu'à le dépasser.

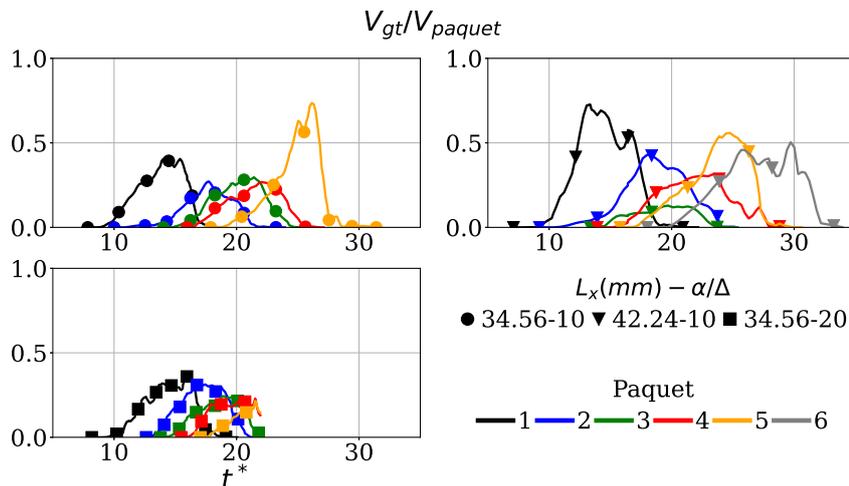


FIGURE 13.11. – Volume des gouttes par paquet, influence des paramètres géométriques.

Le nombre de gouttes est peu influencé par la variation de la longueur longitudinale, Figure 13.12. Pour des paquets analogues en volume initial, tel que le premier, les évolutions du nombre de gouttes sont proches avec des maximums atteints comparables.

À l'opposé, une plus grande résolution implique une surproduction de gouttes qui, au vue de leurs volumes associés, sont de plus petites tailles.

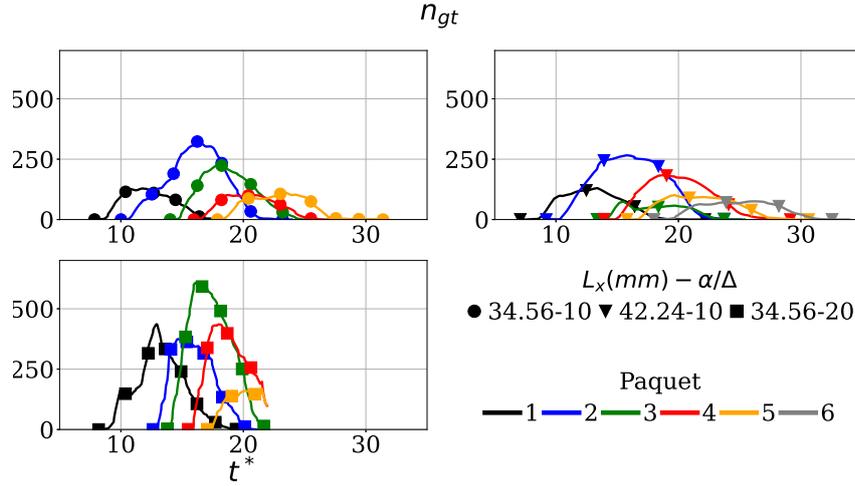


FIGURE 13.12. – Nombre de gouttes par paquet, influence des paramètres géométriques.

Le diamètre de Sauter est le dernier indicateur employé pour caractériser les processus d'atomisation des paquets de ces simulations, Figure 13.13. Une taille de maille identique, Δ_{min} , est choisie pour normaliser ce diamètre caractéristique afin de comparer plus simplement les valeurs atteintes. Cette taille de maille correspond à la plus petite valeur employée dans les simulations analysées, $\Delta_{min} = 15 \mu\text{m}$ Table 13.2, afin de n'exclure aucune goutte de cette analyse.

Les évolutions de ce diamètre sont similaires entre les deux premières simulations. Les seules différences significatives proviennent des valeurs obtenues en fin d'advection des paquets liquides et sont induites par la présence des grosses gouttes restantes générées par un temps d'advection rallongé. Les petites gouttes se stabilisent rapidement avec l'écoulement tandis que les plus larges nécessitent plus de temps.

Concernant la plus fine simulation, ses évolutions sont beaucoup moins importantes et illustrent la trop faible quantité de liquide convertie en gouttes.

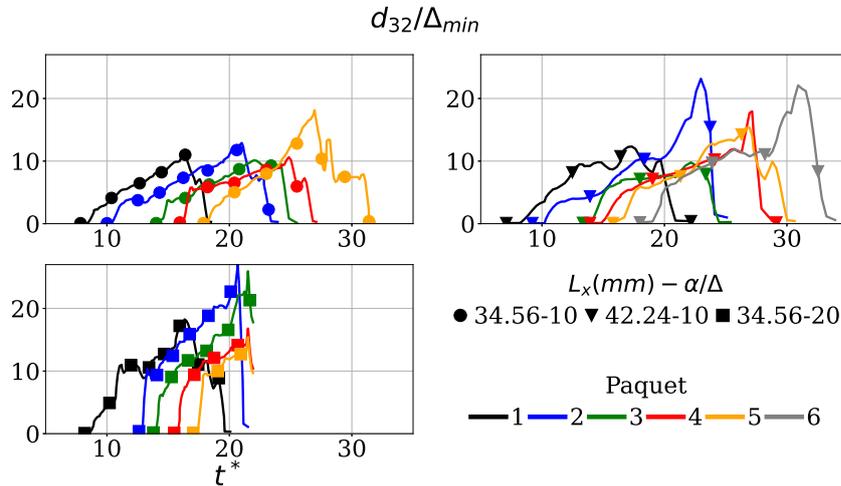


FIGURE 13.13. – Diamètre de Sauter par paquet, influence des paramètres géométriques.

13.6. Caractérisation des gouttes sortantes

L'analyse du cas de référence a démontré que le temps de transit du liquide dans le domaine numérique est inférieur au temps nécessaire à atomiser entièrement un paquet liquide. En conséquence, afin d'analyser correctement les gouttes émises par atomisation, des statistiques sur l'ensemble cumulé de toutes les gouttes pour chaque paquet ont été réalisées.

Pour s'assurer que leurs topologies soient conservées, après leur sortie du domaine, la même méthodologie de reconstruction des vitesses gaz au centre de gravité a été réalisée. Cette dernière permet d'obtenir une mesure de Weber proche des mesures expérimentales. Plus d'informations sur cette méthode sont disponibles section 12.9.

Le Weber qui mesure ce potentiel changement de topologie est illustré Figure 13.14. Bien que quelques valeurs isolées soient élevées, au dessus de la valeur seuil 12, la majorité des gouttes sortantes se situent en dessous de cette limite et donc sont considérées comme stables par la suite.

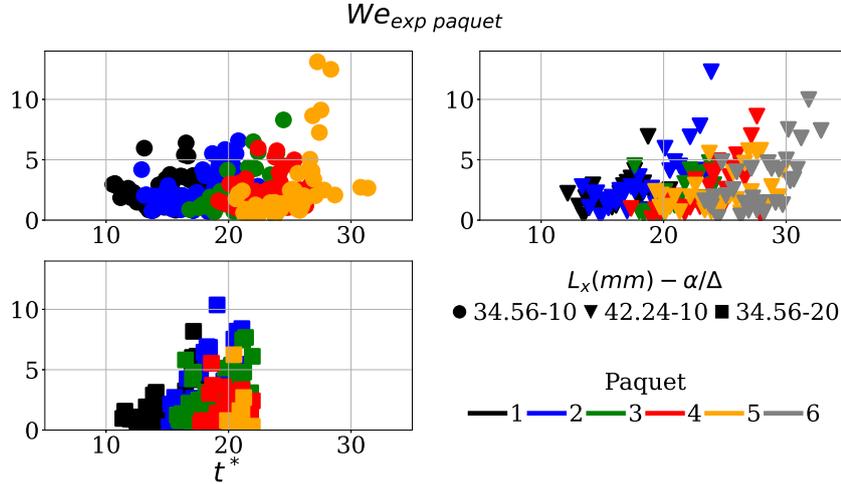


FIGURE 13.14. – $We_{exp\ paquet}$ des gouttes sortantes du domaine, influence des paramètres géométriques.

Grâce à cette condition de stabilité remplie, toutes les gouttes sortantes peuvent être employées pour caractériser plus précisément chaque processus d'atomisation. Plus d'informations sur ces gouttes sortantes sont disponibles en annexe C.2.

Le comportement du nombre de gouttes cumulé, les évolutions ainsi que les maximums atteints sont globalement analogues entre le cas de référence et celui allongé, Figure 13.15. À l'opposé, une augmentation de la précision produit un plus grand nombre de gouttes à l'intérieur du domaine qui, à leurs tours, se répercutent sur cet indicateur.

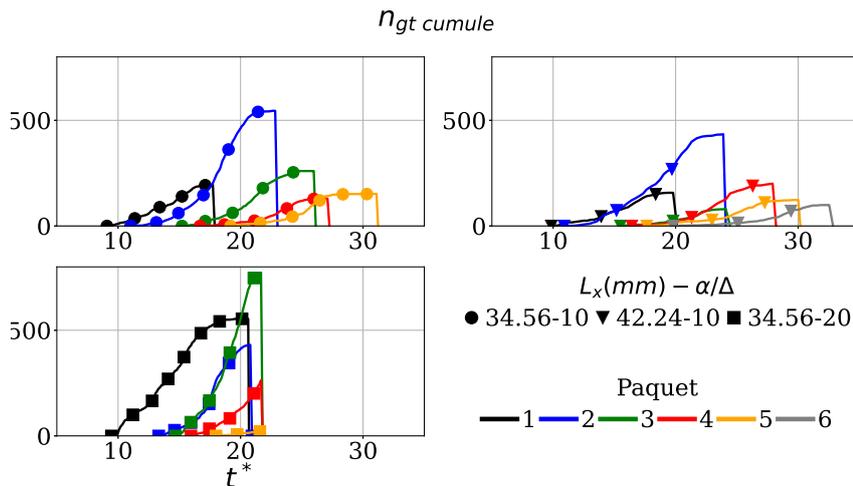


FIGURE 13.15. – $n_{gt\ cumule}$ par paquet, influence des paramètres géométriques.

Bien que les comportements des deux premières simulations soient analogues, les valeurs maximales atteintes de la seconde surclassent celles de la première, Figure 13.16. Cela signifie qu'un domaine plus allongé laisse plus de temps au liquide pour se fragmenter et permet d'obtenir plus de gouttes. De l'autre côté, une taille de maille plus fine induit une augmentation du temps carac-

téristique de rupture des structures liquides qui, dans cette configuration de domaine géométrique et conditions initiales fixes, pénalise l'atomisation du liquide et la formation des gouttes.

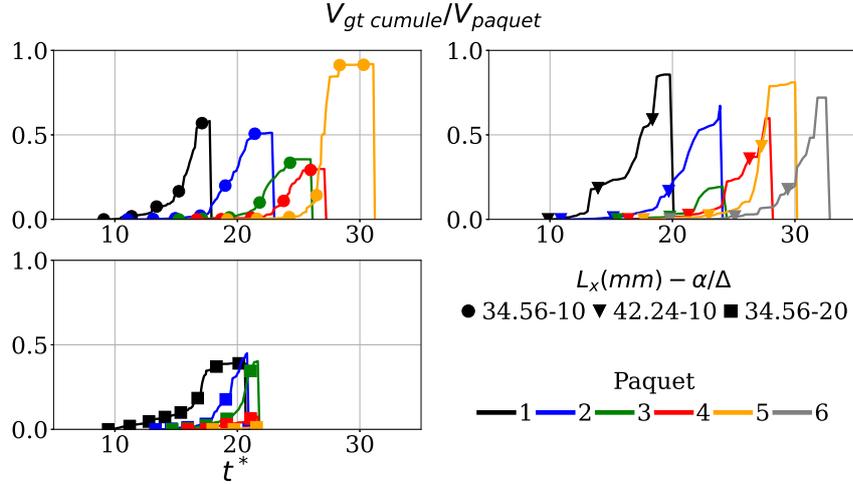


FIGURE 13.16. – $V_{gt\ cumule}$ par paquet, influence des paramètres géométriques.

L'analogie du diamètre de Sauter entre les deux premières simulations se poursuit au-travers de cet indicateur puisque les débuts, les évolutions ainsi que les valeurs finales atteintes pour chacun des paquets sont similaires, Figure 13.16. Pour la dernière simulation, le volume de gouttes moins important malgré un nombre comparable se reflète dans un diamètre de Sauter moins important.

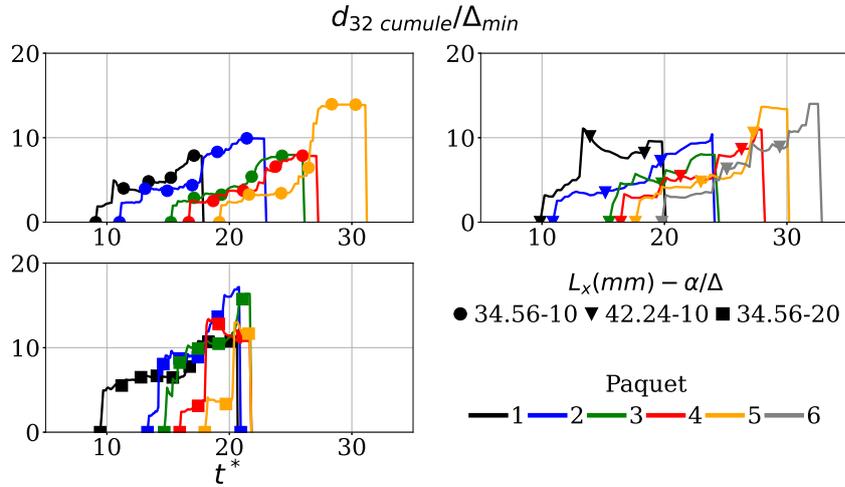


FIGURE 13.17. – $d_{32\ cumule}$ par paquet, influence des paramètres géométriques.

13.7. Comparaison avec l'expérience

Une comparaison avec l'expérience de Dejean [45] a été réalisée en ré-employant la méthodologie de moyenne par cycle décrite section 12.10, Table 13.4.

Pour un volume global détaché analogue, $V_l\ simu/V_l\ init$, l'allongement du domaine de simulation permet d'atteindre un taux d'atomisation plus élevé, $V_{gt\ cumule, simu}/V_l\ simu$, avec un gain de 12 points par rapport au cas de référence. Cependant cette meilleure atomisation éloigne la mesure du diamètre de Sauter, $d_{32\ cumule\ simu}$, de celle de Dejean [45] avec un écart grandissant de 17 points. Cela signifie que la résolution employée dans ces deux simulations n'est pas suffisante pour reproduire précisément un spray possédant ce diamètre caractéristique. À l'opposé, la simulation raffinée n'obtient qu'un faible taux d'atomisation global (29 %) avec un diamètre caractéristique proche de la mesure expérimentale. Ce faible taux d'atomisation implique que

seules les plus petites structures, ayant pu se stabiliser rapidement en gouttes, sont prises en compte dans l'estimation de ce diamètre caractéristique. La valeur obtenue est donc relativement basse (proche de l'expérience) par rapport aux autres simulations mais n'est plus comparable à l'expérience.

$L_x - \alpha/\Delta$ (mm) - (-)	$V_l\ simu/V_l\ init$ (%)	$V_{gt\ cumule, simu}/V_l\ simu$ (%)	$d_{32cumule\ simu}$ (μm)	Écart relatif (%)
34.56 - 10	311	52	297	38
42.24 - 10	313	64	335	56
34.56 - 20	313	29	227	6

TABLE 13.4. – Recueil global des données pour la comparaison avec l'expérience, influence des paramètres géométriques.

13.8. Conclusion sur l'influence des paramètres géométriques

L'objectif de cette étude était d'illustrer de manière qualitative et quantitative l'influence des paramètres géométriques, L_x et Δ , sur le processus d'atomisation.

Les variations de ces deux paramètres influencent peu la génération des paquets puisque les longueurs d'ondes relevées sont analogues. Ainsi, un processus de détachement de liquide similaire est constaté entre ces trois simulations avec des volumes de paquets générés comparables aux mêmes instants.

Les premières observations qualitatives illustrent peu de variations comportementales de la simulation rallongée avec le cas de référence, hormis la génération supplémentaire d'un dernier paquet liquide. A contrario, l'augmentation de résolution retarde les ruptures liquides de types membranes, génératrices de paquet.

D'un point de vue quantitatif, le même processus de génération de paquet par cycle est présent dans chacune des simulations. Toutefois, l'augmentation de la longueur longitudinale et de la résolution impacte fortement l'ensemble de leurs processus d'atomisation.

L'allongement de la longueur longitudinale entraine une présence rallongée des structures liquides dans le domaine de simulation ce qui permet d'obtenir de meilleurs résultats d'atomisation. Pour une même résolution avec le cas de référence, l'augmentation de longueur accroît le temps caractéristique d'advection par rapport à celui des ruptures liquides et permet d'obtenir des taux d'atomisation plus élevés. Les gouttes sortantes, collectées pour approfondir l'analyse, illustrent cet effet bénéfique au-travers d'un gain de 12 points, par rapport au cas de référence, sur le taux d'atomisation global du cycle.

À l'opposé, l'augmentation de résolution, à domaine fixe, agrandit le temps de rupture des structures liquides qui dépasse celui d'advection. Cela se traduit par une sortie prématurée de ces dernières n'ayant pas eu le temps de se fragmenter et une très faible atomisation globale, seulement 29 %.

La solution à ce problème serait un allongement du domaine mais cela implique un surcoût prohibitif, c'est pourquoi cette résolution n'est plus employée par la suite.

Étude en similitude par rapport à l'expérience

Ce chapitre présente les simulations d'atomisation de nappe dans un domaine réaliste effectuées à partir d'études en similitude issues des expériences de Dejean [45].

L'objectif de ces simulations est de retrouver qualitativement et quantitativement des atomisations ligamentaires ayant des variations comportementales analogues à celles constatées sur les points de fonctionnement associées de Dejean [45].

Cette étude reprend et conserve les nombres sans dimension les plus pertinents de leurs points de fonctionnement grâce à la méthodologie de similitude décrite section 6.4. De plus, une analyse identique à celle employée pour le cas de référence a été menée afin de mesurer les caractéristiques des processus d'atomisation.

Sommaire

14.1. Introduction	234
14.2. Nombres sans dimension et conditions initiales	234
14.3. Longueurs d'ondes	234
14.4. Observations du déroulement de l'atomisation	236
14.5. Caractérisation des processus d'atomisation par paquet	237
14.5.1. Caractérisation générale des paquets	237
14.5.2. Présence des ligaments	239
14.5.3. Caractérisation des gouttes	239
14.6. Analyse des gouttes sortantes	241
14.7. Comparaison avec l'expérience	243
14.7.1. Moyenne par cycle	243
14.7.2. Moyenne sur l'ensemble de la simulation	243
14.8. Conclusion sur l'étude en similitude par rapport à l'expérience	244

14.1. Introduction

Un seul domaine géométrique avec son maillage associé a été employé dans cette étude qui reste identique à celui du cas de référence section 12.2. Cette étude compare donc deux nouvelles simulations avec celle du cas de référence, chapitre 12.

14.2. Nombres sans dimension et conditions initiales

Un maximum de nombres sans dimension ont été conservés à partir des points de fonctionnement de Dejean [45], Table 6.2, afin de s'assurer de la reproduction d'un régime d'atomisation ligamentaire. Les nombres sans dimension de cette étude ainsi que les conditions initiales sont résumés Tables 14.1 et 14.2.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
		4954.1	11.52		0.75
$1.2 \cdot 10^{-2}$	598.8	5944.8	16.82	$1.796 \cdot 10^{-2}$	1.08
		6935.9	23.12		1.47

TABLE 14.1. – Nombres sans dimension utilisés pour l'influence des couples $MFR-We$.

ρ_g	U_g	μ_g	ρ_l	U_l	μ_l	σ
	15.81					$5.9 \cdot 10^{-2}$
12	18.97	$1.8 \cdot 10^{-5}$	10^3	2	$1.002 \cdot 10^{-3}$	$6.1 \cdot 10^{-2}$
	22.13					$6.3 \cdot 10^{-2}$
kg/m ³	m/s	Pa s	kg/m ³	m/s	Pa s	N/m

TABLE 14.2. – Conditions initiales utilisées pour l'influence des couples $MFR-We$.

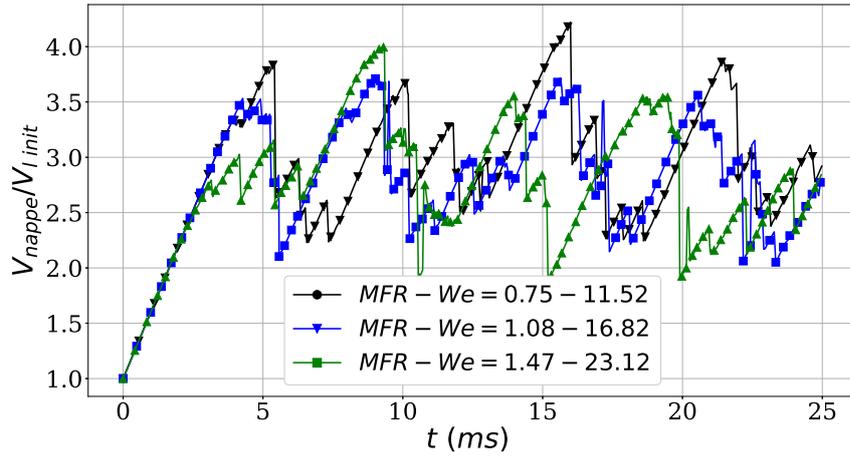
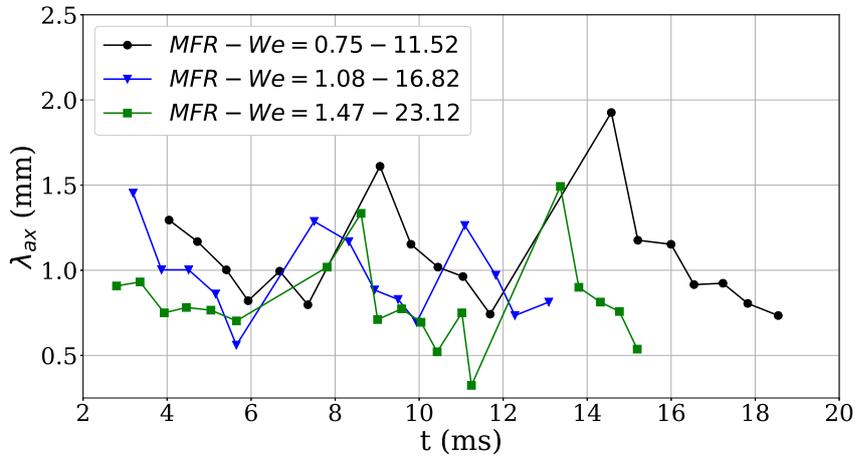
14.3. Longueurs d'ondes

L'augmentation des nombres sans dimension $MFR-We$ illustre un apport d'énergie de la phase gazeuse à celle liquide au-travers du cisaillement. Cela se traduit par une déstabilisation plus importante de la nappe et des lâchers de structures liquides moins volumineux mais plus fréquents, Figure 14.1.

Ces longueurs d'ondes apparaissent plus rapidement et ont une amplitude qui diminue lorsque le couple $MFR-We$ augmente, Figure 14.2. Ce constat conforte l'influence de l'apport d'énergie de la phase gazeuse à celle liquide, en déstabilisant plus intensément la nappe au moyen de plus nombreuses et plus petites longueurs d'ondes.

Toutefois, ce changement des nombres sans dimension n'altère pas l'apparition répétitive de grandes et petites longueurs d'ondes. Ces dernières, sont caractéristiques d'une génération de paquets liquides, laissant présager une conservation de ce phénomène. D'autre part, l'augmentation du couple $MFR-We$ implique un plus grand nombre de longueurs d'ondes de taille plus petites, qui, à leur tour, génèrent un plus grand nombre de paquets de volume réduit.

Les valeurs moyennes déduites de ces relevés sont résumées dans la Table 14.3. Bien que ces dernières soient proches, l'augmentation du couple $MFR-We$ se traduit par un raccourcissement de la valeur moyenne de ces longueurs d'ondes.


 FIGURE 14.1. – Mesures du volume de la nappe débitante, influence des couples $MFR-We$.

 FIGURE 14.2. – Mesures de longueurs d'ondes longitudinales pour l'influence des couples $MFR-We$.

$MFR-We$	0.75-11.52	1.08-16.82	1.47-23.12
$\langle \lambda_{ax} \rangle$ (mm)	1.07	0.97	0.81

 TABLE 14.3. – Valeur moyenne des longueurs d'ondes longitudinales, influence des couples $MFR-We$.

La proximité des valeurs moyennes des longueurs d'ondes des trois configurations permet de ne choisir, en première approximation, qu'une valeur commune pour déterminer un temps caractéristique commun, équation (12.3). Cette dernière est la moyenne des trois valeurs relevées :

$$\langle \lambda_{ax} \rangle = 0.94 \text{ mm} \quad (14.1)$$

14.4. Observations du déroulement de l'atomisation

Quel que soit le couple $MFR-We$ initial, ces allures de l'interface démontrent que les processus d'atomisation emploient un procédé de génération de paquets liquides cyclique dont le début se distingue Figure 14.3 et la fin Figure 14.7. De plus, la présence de structures allongées affirme que le régime d'atomisation reproduit est toujours ligamentaire, Figures 14.4a 14.4b et 14.4c.

Bien que le premier paquet créé soit présent dans chacune des simulations, Figures 14.3a 14.3b et 14.3c, la fréquence d'apparition des suivants varie avec l'augmentation des nombres sans dimension. D'autre part, le volume des paquets semble décroître avec l'augmentation de ces couples initiaux, Figures 14.5a 14.5b et 14.5c, à l'opposé du nombre de structures liquides associées qui ne cesse d'augmenter, Figures 14.6a 14.6b et 14.6c.

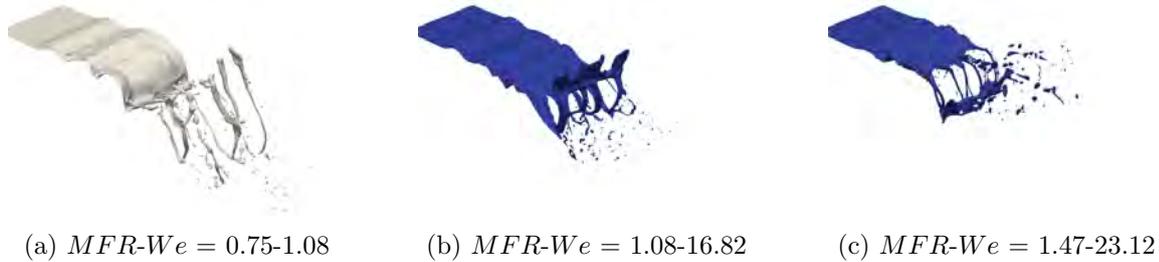


FIGURE 14.3. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 11.46$, influence des couples $MFR-We$.

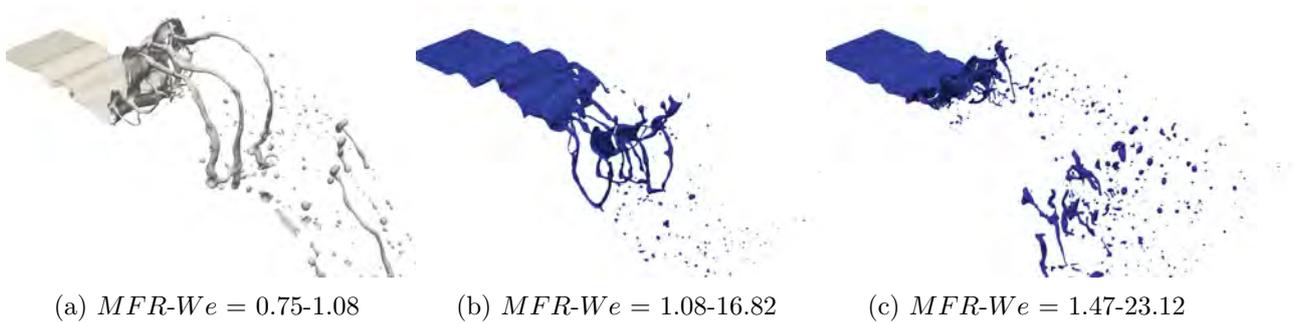


FIGURE 14.4. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 14.32$, influence des couples $MFR-We$.

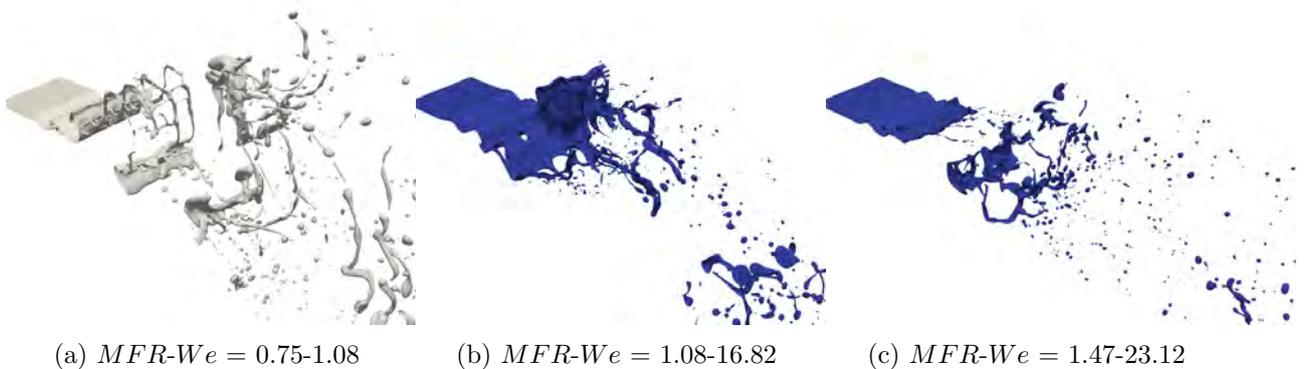


FIGURE 14.5. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 17.2$, influence des couples $MFR-We$.

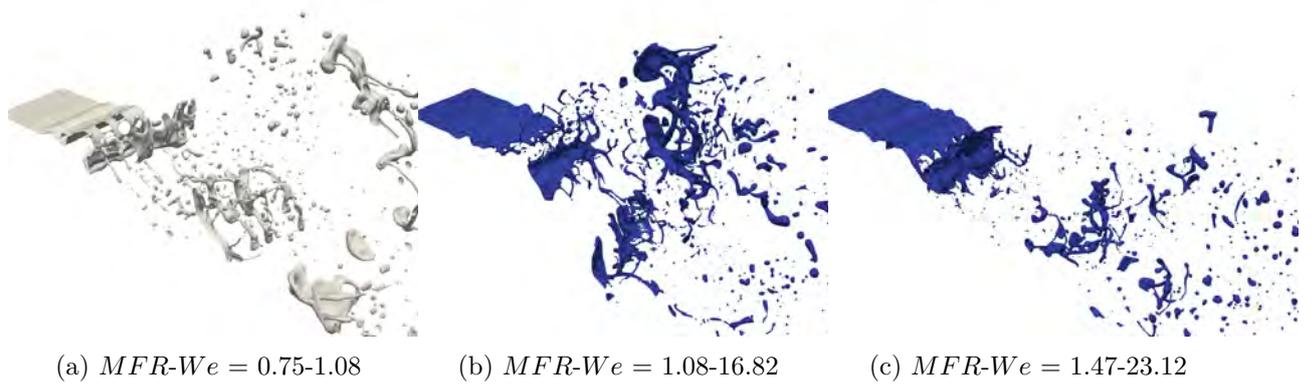


FIGURE 14.6. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 20.0$, influence des couples $MFR-We$.

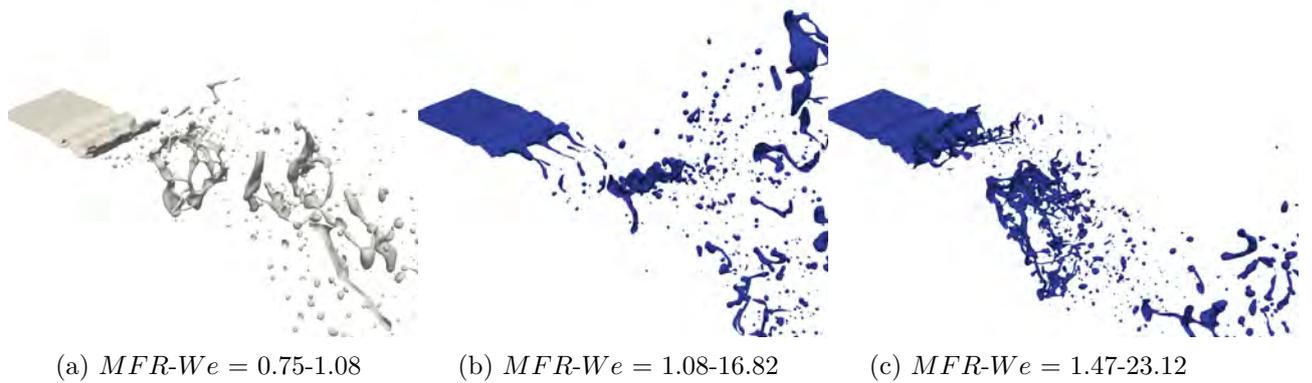


FIGURE 14.7. – Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 23.0$, influence des couples $MFR-We$.

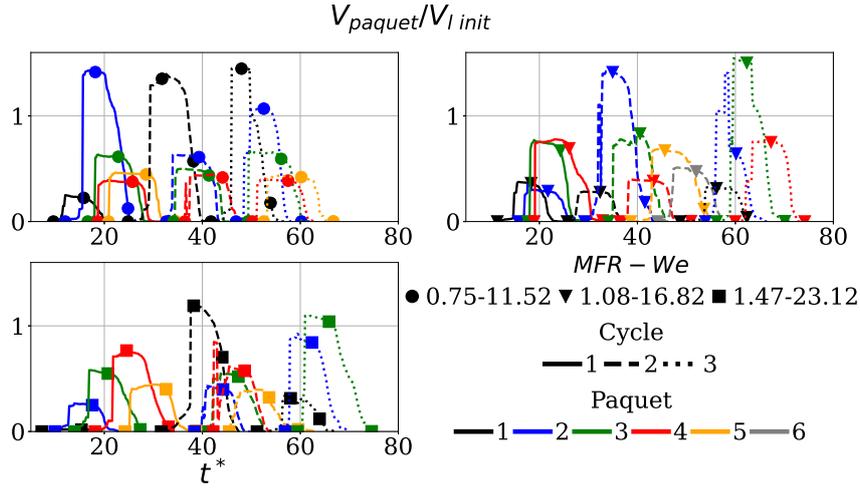
14.5. Caractérisation des processus d'atomisation par paquet

Dans cette étude, trois cycles consécutifs, de chacune des simulations, ont été analysés afin de mieux comprendre l'influence du couple $MFR-We$ sur le processus d'atomisation global.

14.5.1. Caractérisation générale des paquets

Le volume des paquets, $V_{paquet}/V_{l\ init}$ Figure 14.8, illustre une génération de paquets cycliques qui est altérée par les variations des couples $MFR-We$. Le schéma répétitif de création de paquets (un volumineux puis trois plus petits) n'est pas strictement conservé lorsque l'apport d'énergie à la phase liquide augmente. Les différents cycles restent distinctifs mais les schémas d'apparition des paquets sont variables. De plus, l'augmentation de la vitesse gaz débitante favorise les collisions d'amas, appartenant à des paquets différents. Ce phénomène est visible via les transferts de liquides entre paquets, Figure 14.8 pour le dernier cycle de la simulation $MFR-We = 1.08-16.82$.

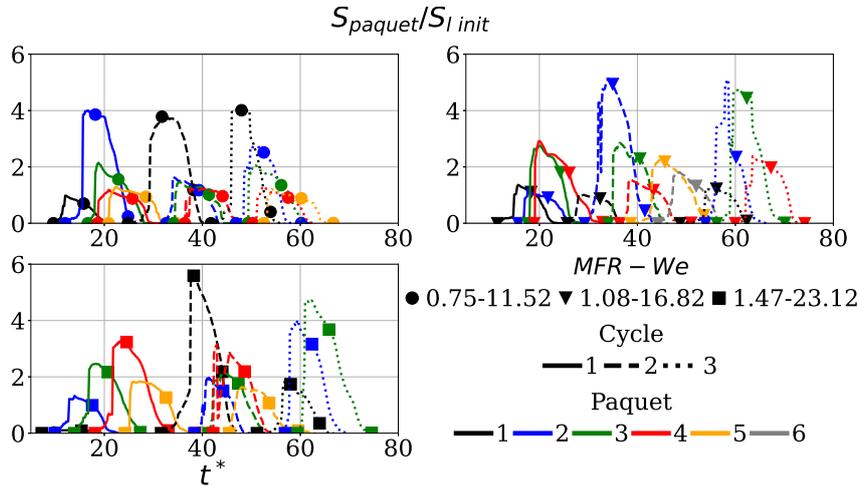
Pour s'assurer d'un suivi précis des amas liquides dans ces nouvelles configurations, l'erreur de volume ϵ_v , est estimée sur l'ensemble des simulations Table 14.4. Les valeurs qui y sont renseignées illustrent une quantité négligeable de liquide non prise en compte par ce suivi de paquet.


 FIGURE 14.8. – Volume liquide des paquet, influence des couples $MFR-We$.

$MFR-We$	0.75-11.52	1.08-16.82	1.47-23.12
ϵ_v	$\approx 10^{-11}$	$\approx 10^{-12}$	$\approx 10^{-12}$
$\epsilon_v/V_{l\ init}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$4.0 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$

 TABLE 14.4. – Maximum d'erreurs de volume par le suivi par paquet, influence des couples $MFR-We$.

Les évolutions de surface de chacune des simulations illustrent l'influence de l'apport croissant d'énergie sur le processus d'atomisation des paquets, Figure 14.9. Cet excédent d'énergie décuple la déstabilisation initiale du liquide et favorise son atomisation puisque les pentes décroissantes de surfaces sont renforcées lorsque les nombres sans dimension augmentent.


 FIGURE 14.9. – Surface liquide des paquet, influence des couples $MFR-We$.

Suite à cette caractérisation générale, le terme V_{paquet} , ne désigne plus la quantité temporelle mais l'intégralité, le maximum, du volume de ce même paquet.

14.5.2. Présence des ligaments

Les pourcentages de volumes ligamentaires atteints démontrent que le type d'atomisation voulu est conservé, Figure 14.10. Ces derniers ont des évolutions semblables, indépendantes de leur volume de paquet. Maximisés, ou proches de l'être, lors de leurs séparations de la nappe liquide, leurs volumes décroissent durant l'advection des paquets en aval du domaine qui caractérise l'avancement de leur atomisation.

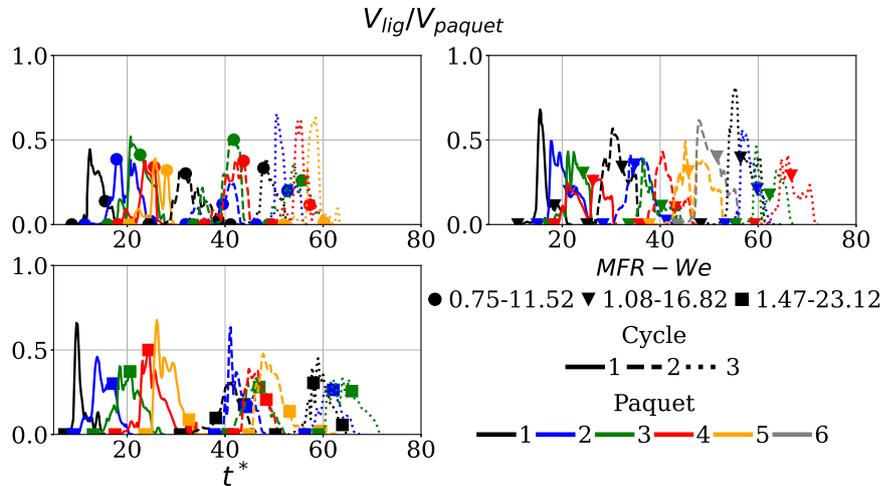


FIGURE 14.10. – Volume des ligaments par paquet, influence des couples $MFR-We$.

Ce surplus d'énergie, déstabilisateur pour le liquide, se traduit par une production accrue de structures liquides et notamment de ligaments, Figure 14.11. Cet apport grandissant décuple les perturbations de l'interface du liquide, Figure 14.6, et favorise l'avancement de l'atomisation et donc la création de ligament.

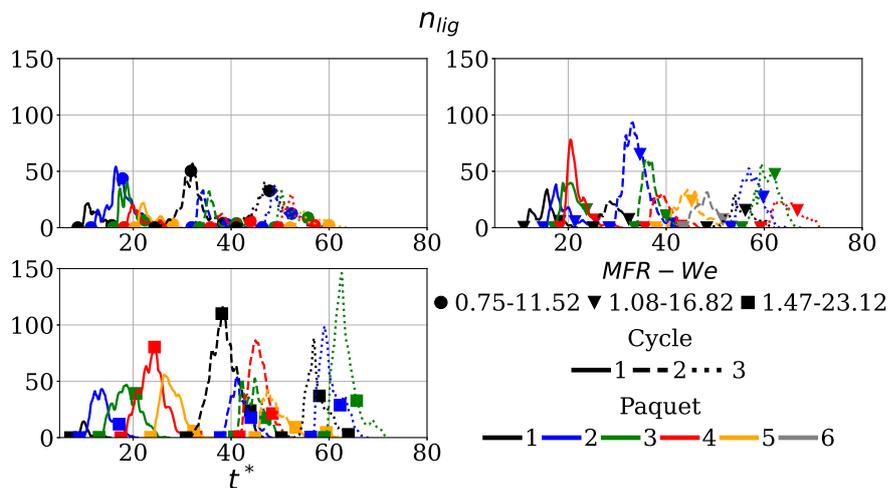
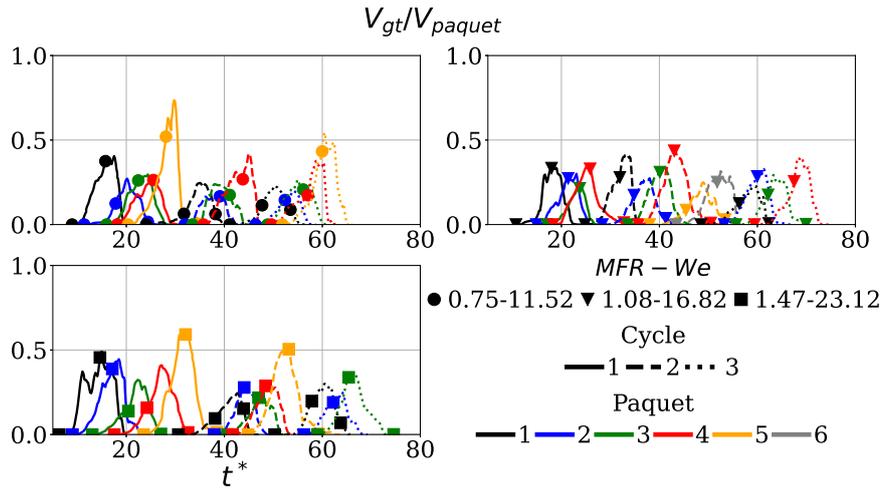


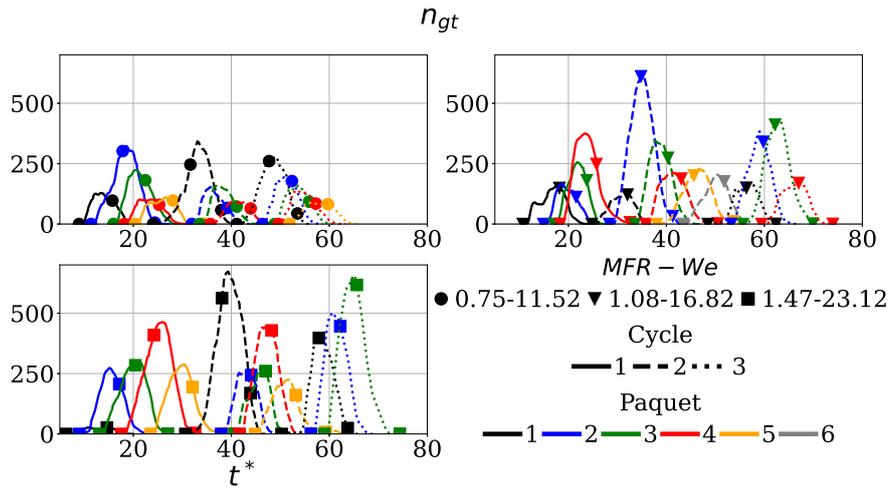
FIGURE 14.11. – Nombre des ligaments par paquet, influence des couples $MFR-We$.

14.5.3. Caractérisation des gouttes

Cette augmentation d'énergie qui se traduit par un processus d'atomisation plus efficace, implique des taux d'atomisation instantanés, internes au domaine, potentiellement plus élevés, Figure 14.12. Bien que des paquets soient très largement convertis en gouttes dans chacune des simulations, les valeurs maximales atteintes progressent, en moyenne, avec l'augmentation des nombres sans dimension.

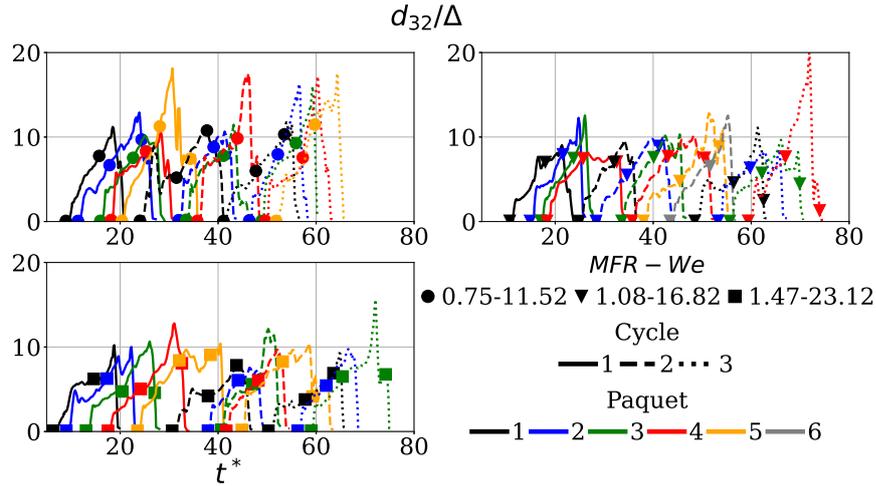

 FIGURE 14.12. – Volume des gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$.

Bien que la résolution soit la même dans chacune des simulations, le nombre de gouttes, associé à un paquet, s'accroît avec les nombres sans dimension. Cet indicateur confirme, les premières impressions visuelles et quantitatives d'amélioration de l'atomisation avec l'augmentation des couples $MFR-We$, Figure 14.13


 FIGURE 14.13. – Nombre de gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$.

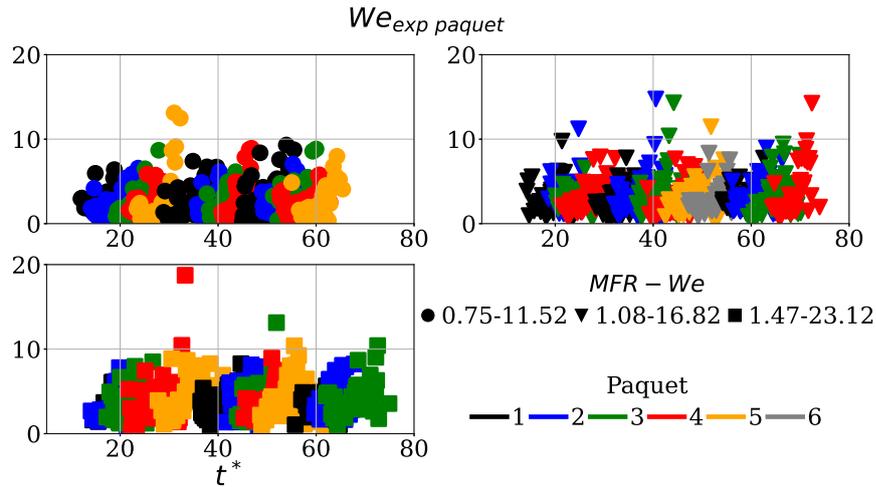
Le diamètre de Sauter, qui se base sur les sprays formés dans le domaine, illustre l'influence de cet apport d'énergie sur le processus d'atomisation, Figure 14.14. Tout d'abord, au sein de chaque simulation, la majorité des courbes et leurs pentes associées sont analogues. Cela signifie que les processus d'atomisation par paquets, d'une simulation, génèrent un spray ayant un diamètre de Sauter équivalent, indépendamment des paquets et de leurs caractéristiques initiales. Une première approximation de ces courbes pourrait être de type linéaire pour une potentielle modélisation comportementale. D'autre part, ce comportement analogue des évolutions du diamètre de Sauter se retrouve dans l'ensemble des simulations. Toutefois, ces pentes d'évolutions diffèrent entre les simulations avec une valeur finale abaissée lorsque le couple $MFR-We$ augmente.

Ceci signifie que le spray généré par un paquet possède un diamètre de Sauter qui ne dépend que des nombres sans dimension initiaux.


 FIGURE 14.14. – Diamètre de Sauter par paquet, influence des couples $MFR-We$.

14.6. Analyse des gouttes sortantes

L'augmentation du transfert d'énergie à la phase liquide se retrouve dans cette mesure puisque, bien qu'en dessous du seuil $We = 12$, les valeurs associées aux gouttes sortantes s'élèvent avec les conditions initiales, Figure 14.15.


 FIGURE 14.15. – $We_{exp\ paquet}$ des gouttes sortantes du domaine, influence des couples $MFR-We$.

Cette condition de stabilité permet d'employer toutes les gouttes sortantes pour enrichir l'analyse des processus d'atomisation de chaque paquet. Plus d'informations sur ces gouttes sortantes sont disponibles en annexe C.3.

Les écarts de nombre de gouttes cumulées entre les simulations démontrent l'importance de l'utilisation de ces dernières, Figure 14.16. Ces écarts, et l'importance qui en découle, s'accroissent avec le surplus d'apport d'énergie à la phase liquide, puisque ce nombre peut dépasser les 1400 gouttes sortantes pour un nombre maximal instantané de 750 gouttes dans le domaine.

L'augmentation des nombres sans dimension favorise l'atomisation ainsi que les taux de conversion du liquide en gouttes, Figure 14.12. Ce constat se retrouve dans les évolutions du volume de gouttes cumulées avec des valeurs finales, par paquet, qui s'élèvent avec cet apport supplémentaire d'énergie, Figure 14.17.

Le diamètre de Sauter des gouttes sortantes illustre que les sprays monodisperses équivalents sont de taille bien plus petite lorsque les nombres $MFR-We$ augmentent, Figure 14.18. Mises à part quelques variations dues à des sorties prématurées de larges gouttes, les évolutions de ce diamètre sont proches d'être linéaires et possèdent une pente similaire à tous les paquets d'une

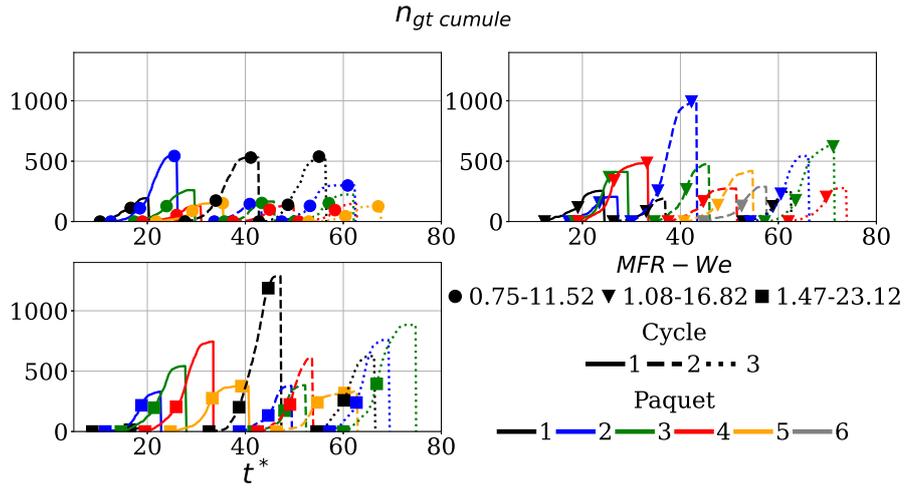


FIGURE 14.16. – $n_{gt\ cumule}$ par paquet, influence des couples $MFR-We$.

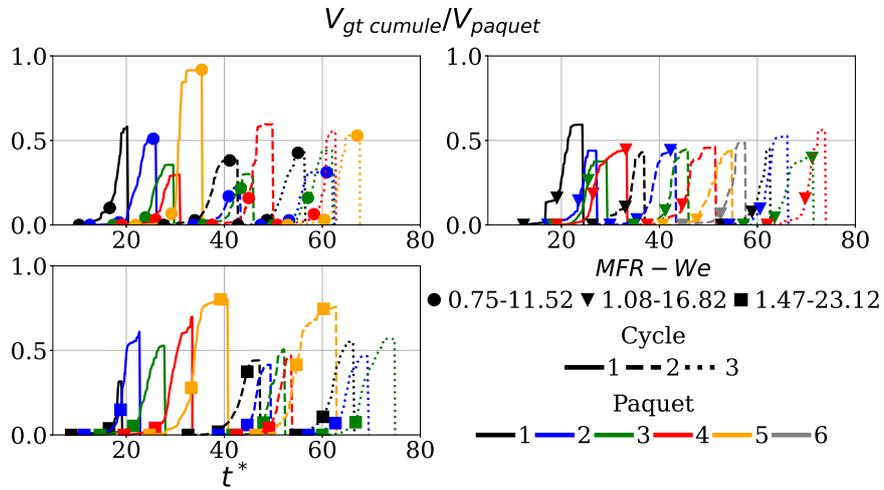


FIGURE 14.17. – $V_{gt\ cumule}$ par paquet, influence des couples $MFR-We$.

même simulation. De la même manière que pour les grandeurs internes et instantanées, cette pente commune à tous les paquets d'une simulation varie en fonction des nombres sans dimension initiaux $MFR-We$.

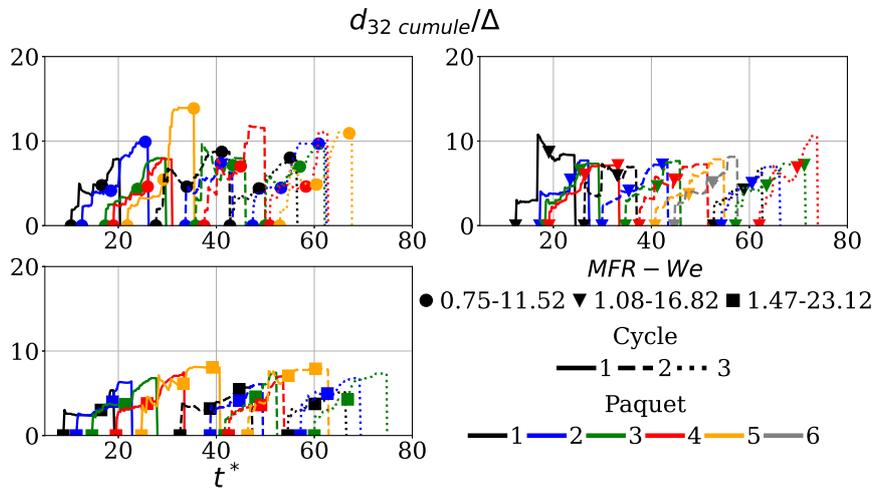


FIGURE 14.18. – $d_{32\ cumule}$ par paquet, influence des couples $MFR-We$.

14.7. Comparaison avec l'expérience

L'utilisation des gouttes sortantes permet une estimation par cycle ainsi qu'une comparaison générale avec les résultats de Dejean [45]. Les différentes mesures de ce dernier, en fonction des nombres $MFR-We$, sont résumées Table 6.4.

14.7.1. Moyenne par cycle

L'augmentation des nombres sans dimension influence la quantité de liquide se détachant de la nappe débitante. Une comparaison à cycle fixe démontre, qu'en moyenne, cette quantité diminue lorsque l'apport d'énergie augmente tandis que les taux de conversion ainsi que les écarts relatifs par rapport aux mesures de Dejean [45] s'élèvent avec les nombres sans dimension. Cela démontre que le domaine de simulation et ses dimensions géométriques semblent plus adaptés à des processus d'atomisation énergétique, qui implique des temps caractéristiques de ruptures raccourcis. Toutefois, bien que les taux d'atomisation soient renforcés par ce supplément d'énergie les écarts avec l'expérience se creusent, illustrant une limite de la résolution numérique pour atteindre un tel diamètre caractéristique. Toutes les données employées pour cette analyse sont résumées Table 14.5.

$MFR-We$ (-) - (-)	Cycle (-)	$V_{l\ cycle}/V_{l\ init}$ (%)	$V_{gt\ cumule,\ cycle}/V_{l\ cycle}$ (%)	$d_{32cumule\ cycle}$ (μm)	Écart relatif (%)
0.75-11.52	1	318	52	297	38
	2	298	37	270	26
	3	364	43	281	31
1.08-16.82	1	228	45	225	39
	2	415	46	226	40
	3	288	48	235	45
1.47-23.12	1	210	66	218	60
	2	344	49	198	46
	3	237	53	201	24

TABLE 14.5. – Recueil des données par cycle, influence des couples $MFR-We$.

14.7.2. Moyenne sur l'ensemble de la simulation

Une comparaison plus générale est réalisée sur l'ensemble de tous les cycles afin d'être plus représentatif des mesures de Dejean [45], Table 14.6.

Les conclusions de l'analyse précédente, à cycle fixe, sont transposables dans cette comparaison globale. L'apport d'énergie croissant diminue la quantité de liquide détachée, rend leur processus d'atomisation plus efficace et produit des sprays s'écartant des mesures d'expérience.

$MFR-We$ (-) - (-)	$V_{l\ simu}/V_{l\ init}$ (%)	$V_{gt\ cumule,\ simu}/V_{l\ simu}$ (%)	$d_{32cumule\ simu}$ (μm)	$d_{32cumule\ simu}/\Delta$ (-)	Écart relatif (%)
0.75-11.52	980	44	284	9.5	32
1.08-16.82	930	46	228	7.6	41
1.47-23.12	791	55	205	6.8	51

TABLE 14.6. – Recueil des données finales, influence des couples $MFR-We$.

Plusieurs pistes peuvent expliquer ces écarts persistant avec l'expérience. Tout d'abord, les dimensions géométriques du domaine numérique peuvent ne pas être suffisamment grandes pour permettre une rupture et une conversion totale du liquide en gouttes. Ce phénomène est visible au-travers de la première simulation, $MFR-We = 0.75-11.52$, qui doit atomiser une plus grande quantité de liquide avec un apport d'énergie plus faible. Ce surplus de liquide implique de potentielles grosses structures, avec des temps caractéristiques de ruptures rallongés, qui, couplés à un apport d'énergie plus faible, font chuter le taux d'atomisation global.

D'autre part, la résolution des simulations semble ne pas être suffisamment fine pour obtenir le diamètre caractéristique de l'expérience. Ce constat se déduit de la dernière simulation, $MFR-We = 1.47-23.12$, qui possède le taux d'atomisation le plus élevé avec l'erreur relative la plus importante. Le diamètre caractéristique obtenu est $d_{32cumule\ simu}/\Delta = 6.8$, proche de la valeur voulue de 4.5. Cette adimensionnalisation illustre le faible écart entre ces deux valeurs et renforce l'hypothèse de limite de résolution pour les plus petites structures, permettant de se rapprocher de la valeur de Dejean [45].

14.8. Conclusion sur l'étude en similitude par rapport à l'expérience

L'objectif de cette étude était de reproduire les processus d'atomisation ligamentaire observés par Dejean [45].

Pour cela, une conservation des nombres sans dimension les plus pertinents fut réalisée sur le domaine et le maillage du cas de référence.

Les allures du volume des nappes ainsi que les longueurs d'ondes mesurées illustrent un phénomène de génération de paquets liquides cycliques mais déjà altérés par les variations des nombres sans dimension initiaux. Toutefois, les valeurs moyennes obtenues pour chacune de ces simulations sont très proches. Cela permet, en première approximation, de n'en choisir qu'une commune à toutes pour la détermination du temps caractéristique.

Les observations qualitatives de ces trois simulations mettent en lumière les premières modifications internes des processus d'atomisation. L'augmentation des nombres sans dimension reflète un apport d'énergie supplémentaire de la phase gazeuse à la phase liquide au-travers du cisaillement. Cela se traduit par une déstabilisation initiale des paquets plus importante ainsi que par la présence d'un plus grand nombre de structures de taille plus petite.

L'analyse des simulations, par le suivi interne des paquets, démontre et confirme un processus cyclique impacté par le surplus d'énergie apporté par la phase gazeuse. Cela se traduit, pour les paquets, par une surface chutant plus rapidement, un nombre et un volume de ligaments croissant qui génèrent, à leurs tours, un plus grand nombre et volume de gouttes. Le diamètre de Sauter, estimé à partir de ces sprays internes, croît et atteint une valeur finale qui décroît lorsque le couple $MFR-We$ augmente.

Cet apport d'énergie impacte l'état dynamique des gouttes sortantes mais reste en dessous du seuil critique, $We = 12$.

Une comparaison des simulations avec l'expérience est réalisée afin d'illustrer si leurs variations comportementales sont analogues. Les gouttes sont, dans un premier temps, comptabilisées par cycle puis rassemblées pour établir une comparaison cohérente avec les mesures d'expériences. Pour un nombre de cycle fixe, cette augmentation du couple $MFR-We$ diminue la quantité de liquide qui se détache de la nappe mais permet une meilleure atomisation de cette dernière. Les écarts relatifs avec les mesures d'expériences grandissent en même temps que le taux d'atomisation. Cela signifie que la résolution employée est trop grossière pour retrouver le diamètre caractéristique voulu. D'autre part, les dimensions géométriques du domaine ne permettent pas aux simulations les moins énergétiques d'atomiser suffisamment de liquide. Dans cette situation, les volumes des paquets sont plus importants avec des temps caractéristiques de ruptures potentiellement supérieurs à celui d'advection. Cela entraîne une chute du taux d'atomisation global et une difficulté à valider correctement les résultats.

Exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine réaliste

Ce chapitre résume l'exploitation des résultats de l'atomisation des nappes dans un domaine réaliste, chapitres 12, 13 et 14.

Dans un premier temps, une comparaison de plusieurs grandeurs caractéristiques de l'atomisation a été effectuée par rapport aux expériences de Dejean [45]. Ces analyses se concentrent sur la longueur de rupture de la nappe, ses mesures fréquentielles ainsi que le diamètre de Sauter produit dans les simulations.

Suite à cela, un modèle LES d'atomisation s'inspirant des approches d'aires interfaciales de Vallet [172] et plus précisément de Chesnel [35] a été réalisé. Ce dernier comporte des paramètres fondamentaux tels que le temps d'équilibre et le nombre de Weber à l'équilibre, qui dans cette étude, sont proposés par le même contexte d'approche phénoménologique. Cette dernière emploie la base de données ordonnée issue du suivi des amas précédemment décrits pour détecter et ne prendre en compte que les structures liquides voulues, à savoir, les gouttes stables dites sortantes.

Sommaire

15.1. Comparaison avec les expériences	246
15.1.1. Longueur de rupture	246
15.1.2. Mesures fréquentielles	248
15.1.3. Corrélation du diamètre de Sauter	250
15.1.4. Conclusion	251
15.2. Paramétrage du modèle LES	253
15.2.1. Temps d'équilibre caractéristique	253
15.2.2. Weber d'équilibre	256
15.2.2.1. Weber d'équilibre basé sur le nombre de gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_n$	256
15.2.2.2. Weber d'équilibre pondéré par le volume de gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_v$	256
15.2.2.3. Weber d'équilibre basé sur le diamètre de Sauter des gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$	257
15.2.2.4. Corrélation des Weber d'équilibre	258
15.2.3. Conclusion	261
15.3. Conclusion à propos de l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine réaliste	262

15.1. Comparaison avec les expériences

L'utilisation de la base de données ordonnée, issue du suivi des structures liquides, permet d'obtenir des informations spécifiques sur n'importe quel amas et notamment sur la nappe. De plus, plusieurs types de visualisation de cette dernière ont été réalisées de manière déportée dans les centres de calcul. Ces relevés sont des vues de profil (\vec{x}, \vec{y}) , ainsi que des vues de dessus (\vec{x}, \vec{z}) , grâce aux sorties de simulation et aux scripts Python employés dans Paraview. Cette génération d'image a été réalisée à distance, sur les centres de calcul hébergeant les simulations, puisque leurs trop larges volumes de données (plusieurs To par simulations) complexifient leurs rapatriements à l'ONERA.

Toutes ces informations rendent accessible une comparaison avec les bases de données de Dejean [45] et Fernández [58]. Pour rappel, la configuration numérique utilisée dans cette étude est proche du dispositif expérimental que ces derniers ont employé pour leurs mesures. D'autre part, ces deux bases de données sont complémentaires puisque leurs conditions opératoires sont différentes.

15.1.1. Longueur de rupture

La longueur de rupture de la nappe liquide ou longueur du cœur liquide, L_{rup} , est une des grandeurs mesurables permettant de correctement caractériser l'atomisation. Plusieurs définitions de cette quantité existent et moyennent ou non dans la direction transverse la distance entre la sortie injecteur et le premier point de rupture liquide, Carvalho et al. [32] Park et al. [132] Fernández [58] et Dejean [45].

Dans cette étude plusieurs relevés de longueurs de nappe sont employées sur les simulations en similitude du chapitre 14. Ces longueurs sont respectivement la distance maximale de l'amas nappe, $L_{nappe\ max}$, sa distance équivalente qui rassemble l'intégralité de son volume en une nappe compacte, $L_{nappe\ inte}$, ainsi que sa distance minimale à l'injecteur, $L_{nappe\ min}$, Figure 15.1.

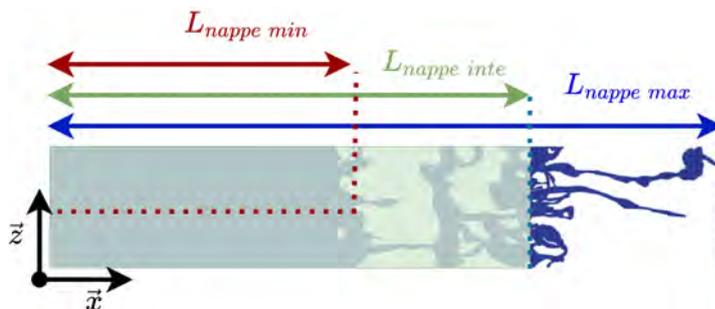


FIGURE 15.1. – Mesures de longueurs de nappe.

Les variations de ces longueurs sont représentées, pour le cas de référence, Figure 15.2. De fortes fluctuations sont visibles et illustrent le détachement successif des paquets liquides. D'autre part, l'ordre d'amplitude des relevés est conservé, quelque soit l'instant d'analyse, avec une longueur maximale supérieure à celle intégrale qui, à son tour, est supérieure à celle minimale.

Chacune de ces longueurs de mesures est moyennée sur trois cycles de générations de paquets liquides afin d'être comparable aux mesures de simulation de Blanchard [25] et Marter-Lagrange [116] ainsi qu'aux résultats d'expériences de Dejean [45] et Fernández [58]. D'autre part, ce procédé d'exploitation des images est ré-appliqué à l'ensemble des simulations réalisées en similitude du chapitre 14, afin d'estimer si la longueur de rupture de la nappe est qualitativement bien conservée au-travers de la conservation des nombres sans dimension choisis.

Pour rappel, Dejean [45] a effectué plusieurs mesures de cette longueur de rupture en fonction de plusieurs conditions d'entrées (U_g) et de cales incluses dans l'écoulement, notées C2 et C9 pour deux et neuf millimètres de hauteur de veine à la sortie de l'injecteur. Fernández [58] a réalisé des essais sur le même dispositif expérimental en surpression, changeant la densité du gaz ρ_g . Blanchard [25] et Marter-Lagrange [116] ont effectué des simulations d'atomisation de cette

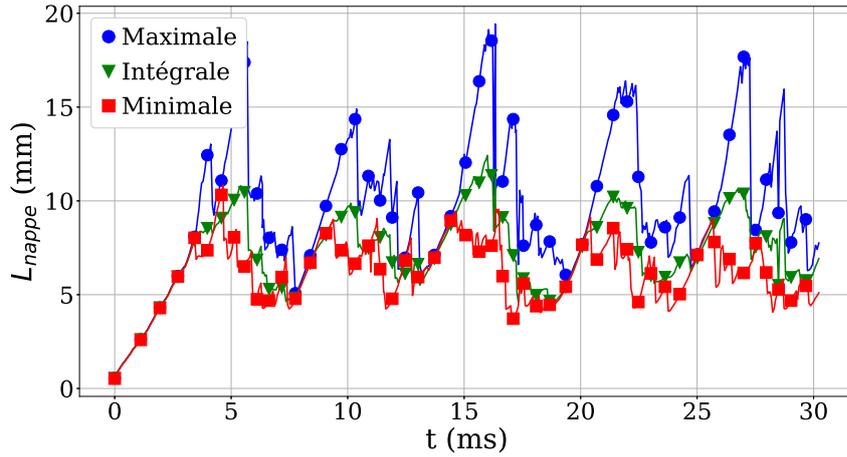


FIGURE 15.2. – Relevé des longueurs de nappes pour le cas de référence.

configuration expérimentale avec les codes numériques SLOSH et DYJEAT en version réduite bidimensionnelle.

Une comparaison de toutes les longueurs de ruptures relevées en fonction de la vitesse gaz d'entrée U_g est présentée Figure 15.3a. Cette dernière est pertinente pour les points de fonctionnement (expérimentale comme numérique) ayant des conditions initiales similaires et ne faisant varier que la vitesse gaz, cas des études de Dejean [45] de Blanchard [25] et de Marter-Lagrange [116]. Les travaux de Fernández [58] ainsi que les simulations présentées au chapitre 14 sont réalisées avec une densité du gaz initiale plus élevée ce qui impacte leurs mesures de longueur de rupture et leurs potentielles comparaisons dans cette représentation, Figure 15.3a.

Afin d'établir un socle commun de comparaison, en s'affranchissant des variations de densité du gaz et de sa vitesse, ces mêmes relevés sont analysés en fonction du rapport des flux de quantités de mouvement MFR , Figure 15.3b. Cette nouvelle échelle permet de comparer les résultats d'expériences de Fernández [58] et Dejean [45] qui possèdent des allures et des valeurs similaires, bien qu'étant réalisées à différents ρ_g et U_g . Les écarts de longueurs de ruptures mesurés entre ces derniers peuvent provenir de l'influence des cales dans la veine d'écoulement puisque les mesures de Dejean [45] diffèrent en fonction de ces dernières. Les mesures de Blanchard [25] et Marter-Lagrange [116], bien qu'évoluant de manière analogue, possèdent des écarts grandissant lorsque le MFR de comparaison se réduit. Cette différence peut s'expliquer par la prédominance des phénomènes transverses dirigeant l'atomisation ainsi que la rupture de nappe à faible MFR . Leurs simulations réduites, bidimensionnelles, négligent cette direction, biaisant leurs mesures à faible MFR . Les mesures de longueurs de nappes des simulations réalisées chapitre 14 sont incluses dans celles de Dejean [45], ce qui assure un comportement qualitatif correct de la nappe. Toutefois, la plage d'étude du MFR relativement réduite n'assure pas que les évolutions de la longueur de rupture soient conformes aux expériences.

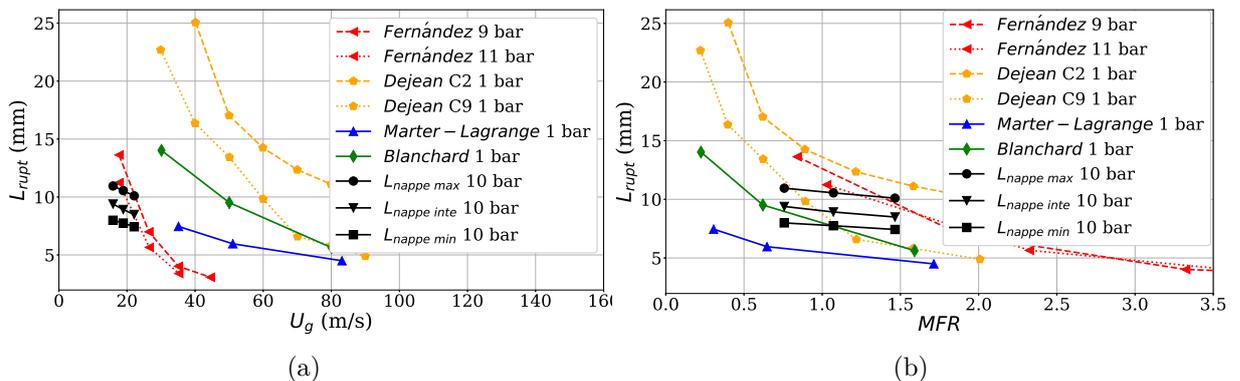


FIGURE 15.3. – Longueurs de rupture.

15.1.2. Mesures fréquentielles

La prochaine comparaison concerne les mesures de fréquences d'oscillations de la nappe. Ces dernières ont été effectuées à partir des sorties de résultats des simulations, c'est-à-dire à un nombre d'itérations fixes.

Ces profils sont réalisés au moyen de scripts Python définissant un plan de coupe centré à l'origine $(\vec{x}, 0, \vec{y})$ dans Paraview, Figure 15.4. Suite à cela, le profil de l'amas nappe est extrait de ces images en employant les mêmes bibliothèques Python d'analyse d'image citées section 12.3. La dernière étape ré-emploie la méthodologie de cette même section 12.3 pour estimer un nouveau profil de hauteur moyenne évoluant en fonction de la distance à l'injecteur, Figure 12.2.

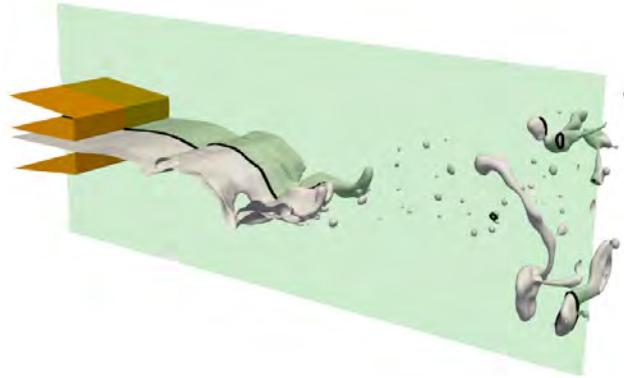
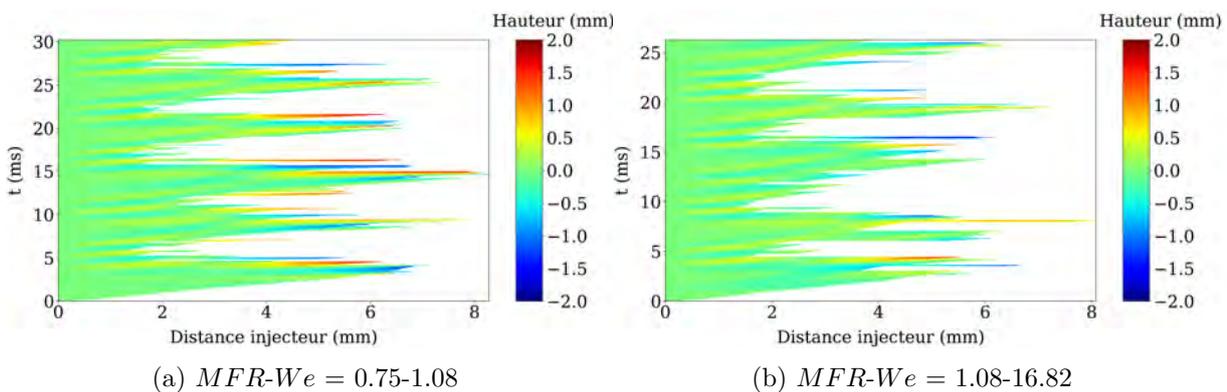


FIGURE 15.4. – Extraction d'une vue de côté de la nappe.

La compilation de ces résultats permet d'obtenir des évolutions de la hauteur moyenne de la nappe en fonction du temps et de la distance à l'injecteur, Figure 15.5.

Quel que soit le point de fonctionnement, ces représentations peuvent être séparées en deux zones. La première, dite proche injecteur, est définie par une absence de rupture liquide de la nappe et s'étend sur environ 2 mm depuis l'injecteur. Les oscillations de la nappe y sont régulières mais de faible amplitude, du fait de la proximité de l'injecteur. La seconde zone, dite éloignée, désigne le reste des représentations en regroupant l'ensemble des ruptures liquides qui illustrent la présence des différents cycles. Les amplitudes d'oscillation de hauteurs moyennes y sont plus intenses et y indiquent des ruptures de nappes proches.



Pour rappel, les sorties des simulations sont enregistrées à un nombre d'itérations fixes, c'est-à-dire un pas temporel potentiellement variable. Pour cette raison, une étape supplémentaire d'échantillonnage et d'extrapolation a été réalisée à l'aide de bibliothèques Python telles que Numpy, Scipy et sa fonction RectBivariateSpline. Un intervalle de temps moyen, sur l'ensemble de la simulation, fut choisi comme pas d'interpolation et définit une fréquence d'échantillonnage proche des 23 kHz. D'autre part, le temps maximal d'analyse varie entre 25 et 30 ms ce qui correspond à une résolution fréquentielle majorée de l'ordre de 50 Hz.

Toutes ces considérations permettent d'obtenir une représentation fréquentielle de la nappe en

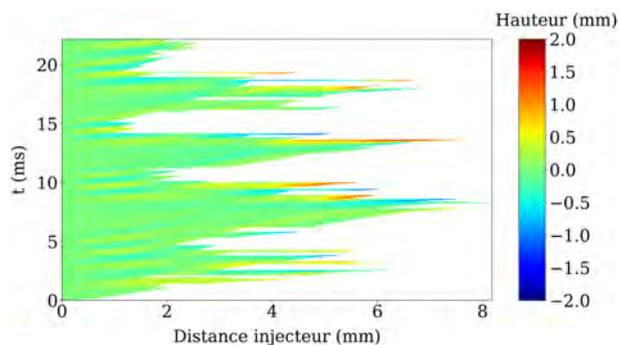
(c) $MFR-We = 1.47-23.12$

FIGURE 15.5. – Hauteur moyenne de la nappe en fonction de la distance à l'injecteur et du temps.

fonction de la distance à l'injecteur, Figure 15.5. Ces dernières sont adimensionnées par l'amplitude maximale détectée dans chacune des deux zones citées précédemment, proche (inférieur à 2 mm) et éloignée (supérieur à 2 mm) de l'injecteur.

Dans la zone proche de l'injecteur, les amplitudes les plus significatives se situent dans les hautes fréquences avec l'émergence de deux valeurs principales aux alentours des 800 Hz. Dans la seconde zone dite éloignée de l'injecteur, les principales fréquences détectées correspondent à la présence ou non, du liquide et sont donc liées aux phénomènes de rupture de la nappe. Les grandes longueurs de nappe sont séparées par de petites chaque (environ) 5 ms (200 Hz) Figures 15.5 et 15.6.

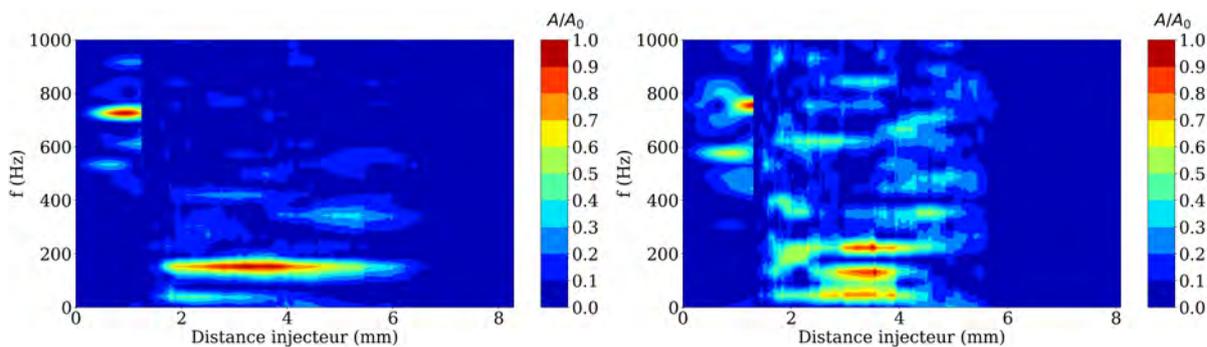
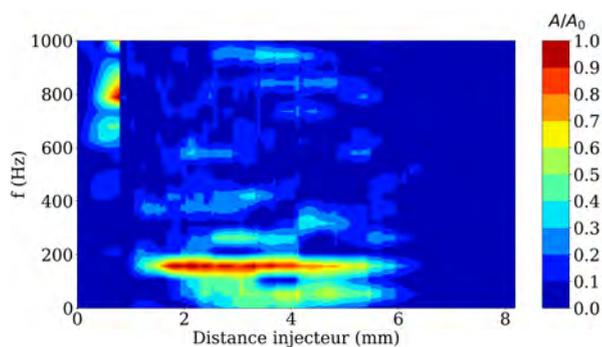
(a) $MFR-We = 0.75-1.08$ (b) $MFR-We = 1.08-16.82$ (c) $MFR-We = 1.47-23.12$

FIGURE 15.6. – Fréquence de la nappe en fonction de la distance à l'injecteur et du temps.

Ces relevés fréquentiels sont comparés aux résultats numériques bidimensionnels de Blanchard [25] et Marter-Lagrange [116] ainsi qu'aux expériences de Fernández [58] et Dejean [45]. Les deux premières fréquences relevées se situent dans la zone proche injecteur et correspondent aux fréquences possédant les amplitudes les plus élevées, notées f_0 et f_1 . La dernière fréquence mesurée

correspond à celle dominant la zone éloignée de l'injecteur, notée f_2 . Les différentes mesures fréquentielles sont illustrées en fonction de la vitesse gaz initiale Figure 15.7a. Les meilleures concordances correspondent aux simulations ayant les mêmes conditions initiales, grandeurs dimensionnelles, que l'expérience. Ainsi Blanchard [25] et Marter-Lagrange [116] ont des mesures qualitativement en accord avec l'expérience de Dejean [45]. Toutefois, de tels résultats ne se transposent pas à ceux de Fernández [58] puisque d'autres conditions initiales ont été employées.

Afin d'analyser toutes ces mesures, numériques comme expérimentales, le *MFR* fut employé pour établir un socle commun de comparaison et regrouper toutes les variations des conditions initiales, Figure 15.7b. Les résultats, à priori éloignés, de Fernández [58] et Dejean [45] se rassemblent avec des valeurs proches et des évolutions similaires. La fréquence mesurée dans la zone éloignée de l'injecteur, f_2 , varie peu en fonction des variations des conditions initiales. Cette dernière se situe aux alentours des 200 Hz et représente le phénomène d'allongement et de rétractation de la nappe suite à sa rupture liquide. Les faibles variations démontrent que les conditions initiales influencent peu ce phénomène, pour cette plage de variations, dirigé par la rupture liquide et donc la taille de maille Δ . Les deux autres fréquences, f_0 et f_1 , possèdent des évolutions qualitativement comparables aux résultats d'expériences, notamment f_1 dont les valeurs sont comparables, en terme de précision, avec celles de Blanchard [25].

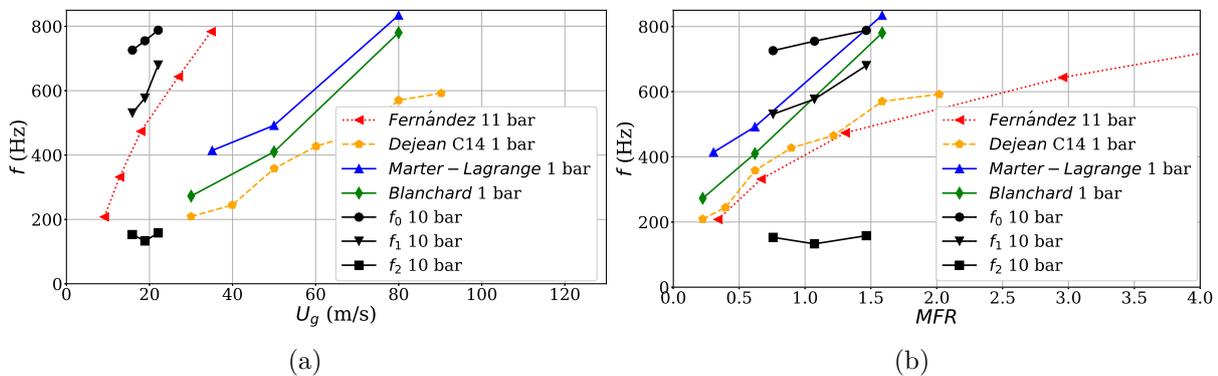


FIGURE 15.7. – Fréquences.

15.1.3. Corrélation du diamètre de Sauter

À la différence des deux comparaisons précédentes, les diamètres de Sauter obtenus en fonction des nombres sans dimension initiaux ne s'appuient que sur la méthodologie de suivi des amas ainsi que la prise en compte des gouttes sortantes.

Les résultats de Dejean [45] à plusieurs vitesses gaz constituent une base de données expérimentales à laquelle se référer, Figure 15.8a.

Toutefois, les diverses conditions initiales influencent grandement les allures ainsi que les évolutions de ces résultats. Pour cette raison, le paramètre de comparaison suivant reprend les conclusions de l'étude des nappes périodiques section 11.1.2, notamment sur le découplage et l'influence séparée du *MFR* et du We , en employant le Weber comme paramètre de comparaison, Figure 15.8b.

Une corrélation du diamètre de Sauter (d_{32corr}) est estimée à partir des valeurs obtenues des simulations, Table 14.6. Cette dernière s'inspire de la formulation équivalente déterminée dans l'étude des nappes cisailées dans un domaine périodique, équation (11.6). Dans cette étude, les constantes $d_{32}^*(t^*_{cmp})$ et D sont ajustées aux résultats des simulations, équation (15.1).

$$d_{32corr}(We) = \frac{d_{32}^*(t^*_{cmp})}{WeD} \quad \text{avec} \quad d_{32}^*(t^*_{cmp}) = A = 906 \ \& \ D = 0.47 \quad (15.1)$$

Suite à cette estimation, la corrélation estimée fut transposée sur les résultats expérimentaux les plus proches à l'aide d'une nouvelle constante C , équation (15.2).

$$d_{32corr}(We) = \frac{d_{32}^*(t_{cmp}^*)}{We^D} + C \quad \text{avec} \quad C = -70 \quad (15.2)$$

Les résultats de simulation, bien qu'entachés d'erreurs, possèdent une évolution analogue aux résultats obtenus par Dejean [45]. La corrélation estimée à partir des résultats de simulation ainsi que sa version transposée sur ces résultats d'expériences démontrent une bonne concordance qualitative en étant appliquée sur un plus grand ensemble de points d'analyse.

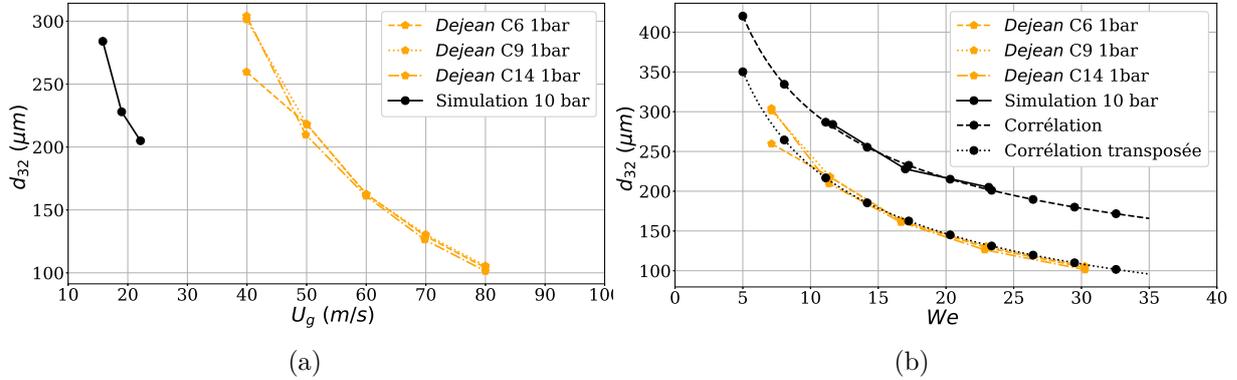


FIGURE 15.8. – Diamètre de Sauter.

Les deux constantes employées pour établir la corrélation du diamètre de Sauter de cette étude diffèrent de celles de l'étude périodique. Bien qu'étant proches en valeur, ces différences peuvent provenir du taux d'atomisation final ainsi que de la résolution ayant augmenté dans cette étude.

15.1.4. Conclusion

L'objectif de cette section était de comparer plusieurs quantités issues des simulations avec des résultats d'expériences (Fernández [58] et Dejean [45]) ainsi que des résultats numériques (Blanchard [25] et Marter-Lagrange [116]) établis sur une configuration d'étude similaire et donc de vérifier si la similitude $MFR-We$ est efficace pour classifier le régime d'atomisation.

La première quantité analysée est la longueur de rupture et ses variations en fonction des nombres sans dimension initiaux. Plusieurs mesures ont été effectuées, $L_{nappe\ max}$, $L_{nappe\ inte}$ et $L_{nappe\ min}$, et confirment toutes l'influence de ces nombres sur cette dernière. La comparaison des résultats de simulation avec ceux de Dejean [45] Fernández [58] Marter-Lagrange [116] et Blanchard [25] n'est pas aisée puisque ces derniers emploient différentes conditions initiales. Pour cette raison, le rapport des flux de quantité de mouvements, MFR , est employé comme paramètre d'analyse puisque ce nombre prend en compte toutes les variations des conditions initiales des études citées précédemment. En effet, celles s'étant déroulées à des vitesses et pressions gaz initiales différentes deviennent comparables avec des évolutions analogues. Les résultats des simulations sont qualitativement proches des expériences et comprises entre les bornes minimales et maximales de Dejean [45]. Les écarts de longueur de rupture en fonction du MFR divergent pour les plus petites valeurs ($MFR = 0.75$) et laissent présager l'influence grandissante d'un nouveau paramètre qui n'est pas pris en compte par ce nombre sans dimension.

La deuxième quantité investiguée est la fréquence de battement de la nappe liquide. Cette dernière est reconstruite à partir des profils de l'interface de la nappe relevés sous Paraview dans un plan fixe centré à l'origine $(\vec{x}, 0, \vec{y})$. Une analyse fréquentielle de ces profils est réalisée en fonction de la distance à l'injecteur, en séparant cette dernière en une zone proche injecteur, où la nappe ne se rompt pas, et une zone éloignée, soumise aux ruptures liquides. Des mesures fréquentielles extraites de ces deux zones illustrent plusieurs phénomènes. Tout d'abord, la fréquence d'amplitude la plus élevée en zone éloignée n'est reliée qu'aux ruptures liquides et se positionne, quelles que soient les conditions initiales, autour des 200 Hz. D'autre part, les relevés en zone proche injecteur démontrent une dépendance des deux fréquences d'amplitudes les plus élevées aux nombres sans dimension initiaux. Les représentations en fonction du MFR permettent de

comparer les résultats de Dejean [45], Fernández [58], Marter-Lagrange [116] et Blanchard [25] sur un socle commun. Les évolutions de ces fréquences sont en accord avec les résultats expérimentaux de référence même si un écart significatif est conservé.

Le dernier paramètre d'étude est le diamètre caractéristique de Sauter, relevé des simulations grâce au suivi et la sélection des gouttes sortantes. Ces résultats sont comparés avec ceux de Dejean [45] effectués à plusieurs vitesses gaz. Le nombre de Weber est choisi comme grandeur de comparaison pour rassembler les résultats d'une manière exploitable, conformément à l'étude périodique précédente, section 11.1.2. Bien qu'un écart soit présent entre la mesure des simulations et l'expérience, ce dernier reste constant quelque soit le point de fonctionnement. Cela traduit une reproduction fidèle des variations comportementales du spray induites par les modifications des conditions initiales et des nombres sans dimension. Une corrélation construite sur une base identique à celle de l'étude périodique, section 11.1.2, démontre un comportement adéquat avec les résultats de Dejean [45] pour les plages d'études du Weber.

15.2. Paramétrage du modèle LES

Les différents modèles d'atomisation assistée se basant sur les approches d'aires interfaciales (Vallet [172], Lebas [99]) emploient la formulation de Reitz [147] avec un temps caractéristique ainsi qu'une valeur seuil de diamètre, section 2.3.2.1.4. Dans un contexte LES, Chesnel [35] propose une application d'un tel modèle pour récupérer les informations sous mailles filtrées par la taille de maille grandissante. Ce dernier associe au temps caractéristique les phénomènes de turbulence de l'écoulement et l'énergie cinétique turbulente à la densité d'interface sous maille (sous l'hypothèse forte d'un Weber d'équilibre unitaire). Plus d'informations sur ce modèle sont disponibles section 3.3.4.

Dans cette approche phénoménologique, les phénomènes relatifs à la turbulence ne sont pas supposés piloter le processus d'atomisation. Le temps caractéristique de mise à l'équilibre du modèle de Chesnel [35] est associé à la durée nécessaire aux structures liquides pour atteindre un état topologique stable, ne variant plus ou peu par la suite. Le second paramètre est le Weber d'équilibre qui, dans cette approche, permet au modèle de tendre vers une taille caractéristique correspondant à des structures liquides à l'équilibre avec le gaz cisailant. L'utilisation de ces deux paramètres permet de récupérer la contribution de densité d'interface sous maille dans les simulations aux grandes échelles.

Dans cette étude de nappe liquide débitante, ces deux quantités sont estimées à partir des simulations décrites chapitres 12, 13 et 14 et plus particulièrement sur les ensembles de gouttes sortantes qui sont représentatives des spray finaux des processus d'atomisations.

15.2.1. Temps d'équilibre caractéristique

Le temps caractéristique du modèle LES de Chesnel [35] désigne la durée nécessaire aux gouttes liquides pour atteindre un état stable ne variant plus par la suite. Dans cette configuration de nappe débitante, les mesures de Weber réalisées indiquent que les gouttes sortantes ne subissent que peu d'atomisation secondaire. Leurs topologies étant conservées, ces dernières constituent donc une base de données fiable pour l'estimation de ce temps caractéristique.

Grâce au suivi des amas avec leur identification et classification, les gouttes sortantes sont repérables dès leur création dans le domaine de simulation. De cette manière, pour chaque paquet, l'intervalle de temps entre la génération de la première et de la dernière goutte sortante (au sein du domaine de simulation) représente ce temps d'équilibre caractéristique. La Figure 15.9 montre le taux d'atomisation d'un paquet, c'est-à-dire le volume des gouttes produites par ce paquet sur le volume total du paquet, en fonction du laps de temps nécessaire Δt^* équation (12.3). Ces durées représentent un temps d'équilibre par paquet qui fluctue entre 2 et 9 Δt^* .

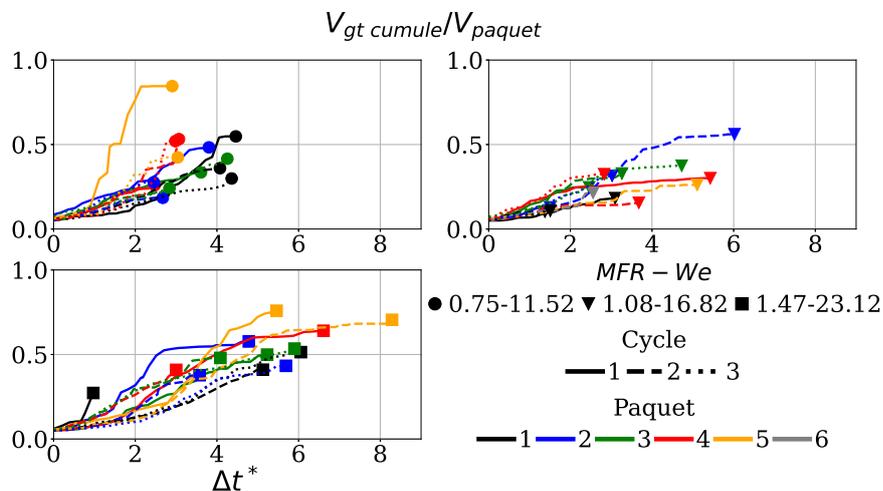


FIGURE 15.9. – Évolution des taux d'atomisation par paquet en fonction de leurs temps d'équilibre.

Par la suite, chaque paquet est représenté par son taux d'atomisation final ainsi que son propre temps d'équilibre, Figure 15.10a. Les temps caractéristiques se concentrent entre 4 et 8 Δt^* , tandis que les taux d'atomisation s'incrémentent avec l'augmentation du MFR et du Weber.

L'ensemble des gouttes sortantes générées durant un cycle, $V_{gt\ cumule, cycle}$, est rassemblé puis normalisé par le volume de liquide détaché durant ce cycle, $V_l\ cycle$. Le temps d'équilibre d'un cycle est estimé à partir de celui de ses paquets en les pondérant par leurs volumes de goutte respectifs, Figure 15.10b. Cette représentation confirme les observations précédentes, à savoir, une meilleure atomisation lorsque les nombres sans dimension augmentent ainsi qu'un laps de temps nécessaire à son obtention proche de $\tau_{eq}^* \approx 6$.

Une ultime comparaison est effectuée pour le temps d'équilibre sur l'ensemble des cycles de chaque simulation. Pour cela, l'ensemble du volume des gouttes sortantes, $V_{gt\ cumule, simu}$, est normalisé par le volume liquide total détaché, $V_l\ simu$, Figure 15.10c. Cette comparaison permet d'avoir une vue d'ensemble des taux d'atomisation de chaque simulation ainsi que de la durée nécessaire à son obtention.

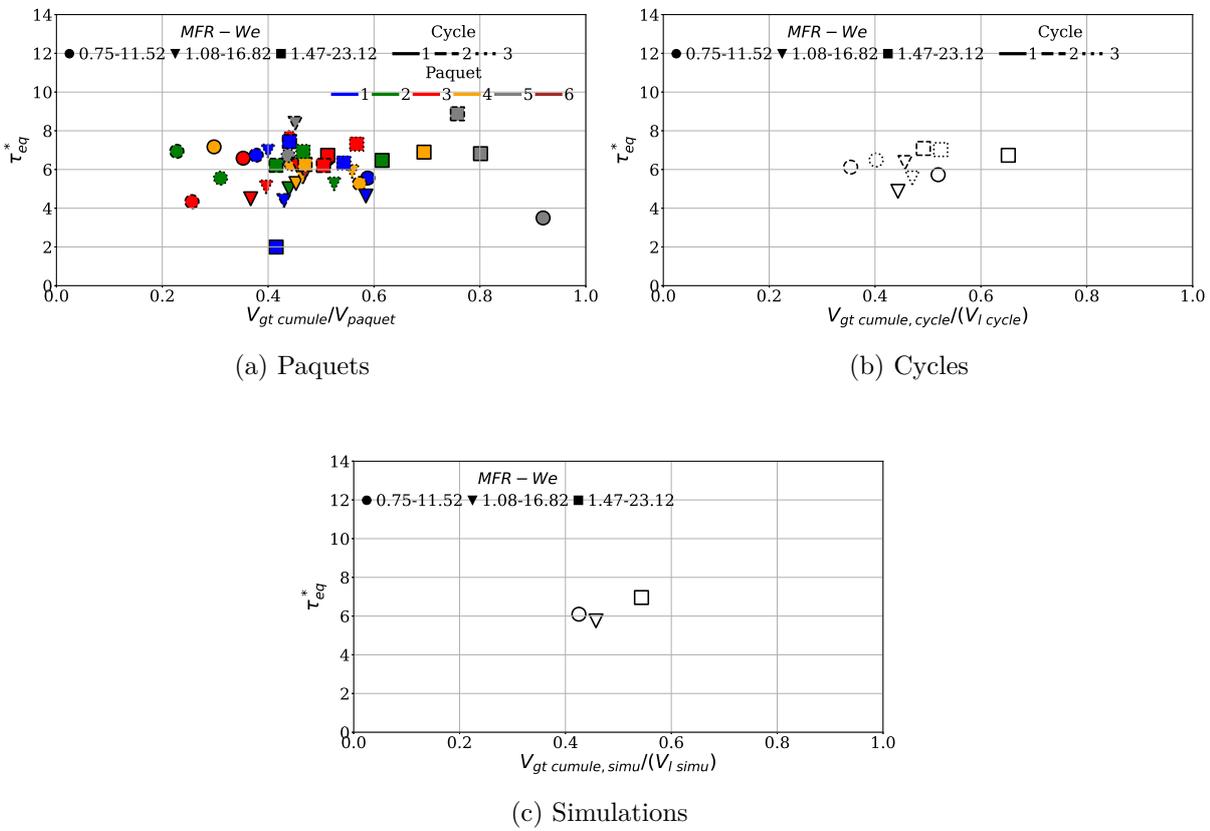


FIGURE 15.10. – Représentations des taux d'atomisation en fonction de leurs temps d'équilibre.

Le temps d'équilibre normalisé, $\tau_{eq}^* \approx 6$, permet d'estimer une valeur dimensionnelle, τ_{eq} , dépendante des nombres sans dimension initiaux, équation (15.3).

$$\begin{aligned} \tau_{eq}^* &= B && \text{avec } B = 6.0 \\ \tau_{eq} &= B \frac{\langle \lambda_{ax} \rangle}{U_l} \sqrt{\frac{\hat{\rho}}{MFR}} \hat{\rho}^{-C} && \text{avec } C = -0.4 \end{aligned} \quad (15.3)$$

Ce temps d'équilibre, τ_{eq} , est comparé au temps de convection, τ_{conv} :

$$\tau_{conv} = \frac{L_x - L}{\langle U_g \rangle} \quad (15.4)$$

Ce dernier s'exprime en fonction de la vitesse moyenne du gaz, $\langle U_g \rangle$, ainsi que de la distance que parcourt le liquide depuis l'injecteur, $L_x - L$, Figures 7.3 et 7.4

La proximité de ces deux temps caractéristiques illustre que les processus d'atomisation sont contraints par la dimension longitudinale du domaine géométrique trop limitée, Table 15.1. Les taux d'atomisation finaux ne dépassent pas les 60 % ce qui démontre un manque de conversion de liquide en gouttes.

MFR	0.75	1.08	1.47
τ_{eq} (ms)	2.1	1.8	1.5
τ_{conv} (ms)	2.2	1.9	1.6

TABLE 15.1. – Recueil des temps d'équilibre et des temps de convection.

Une piste supplémentaire pour expliquer ce manque d'atomisation provient des conditions limites de type glissement appliquées aux parois latérales du domaine. Ces dernières, de part leur positions très proches pour des raisons de coûts numériques, constituent un frein à la déstabilisation et la fragmentation des amas qui y sont amassés. Pour rappel, le type de structure ayant un côté commun avec le domaine de simulation est classifié comme amas de type Bord, Figures 12.17 et 12.19.

Le manque d'atomisation des simulations provient de ce type d'amas constituant la principale réserve de liquide ne s'étant pas fragmentée. Ces derniers sont illustrés par des encadrements gris de leurs enveloppes respectives Figure 15.11. Ces amas, très volumineux dès le début de la génération des paquets, se fragmentent lors de leurs advections mais conservent une large quantité de volume liquide jusqu'à la sortie du domaine, expliquant les taux d'atomisation réduits. Ce phénomène préjudiciable aux processus d'atomisation est décuplé lorsque l'apport d'énergie de la phase gazeuse à celle liquide est faible.

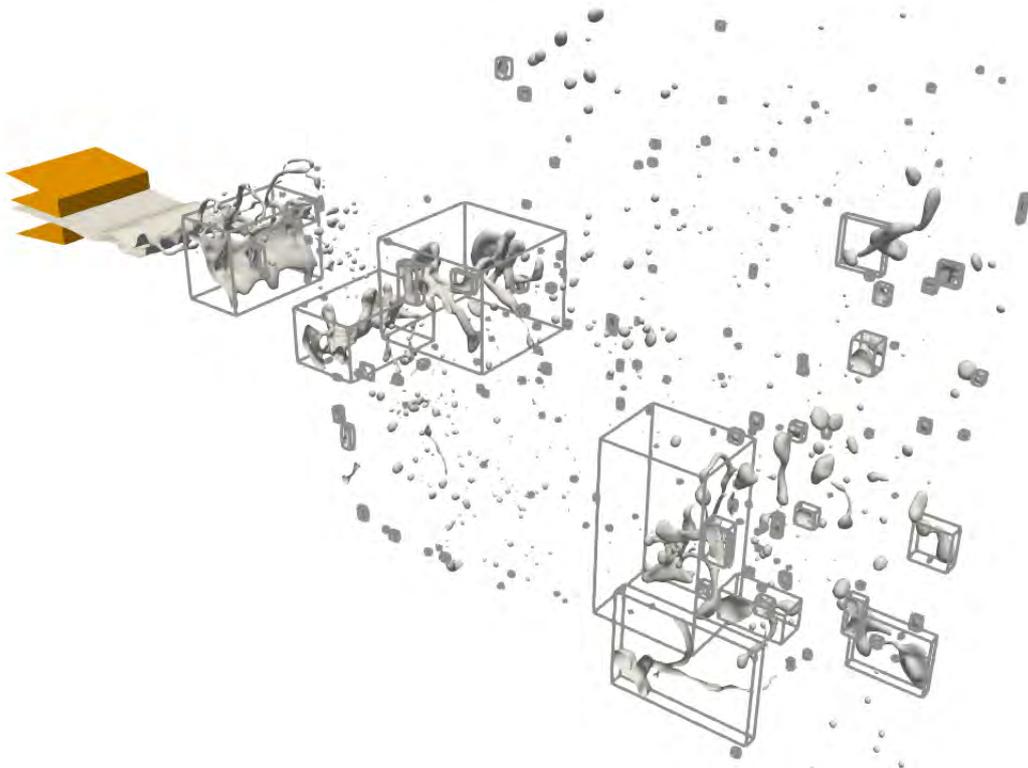


FIGURE 15.11. – Structures non atomisées dans le domaine de calcul.

15.2.2. Weber d'équilibre

Le Weber d'équilibre est une valeur du nombre de Weber pour lequel les structures liquides voient un équilibre entre les forces de cisaillement et la tension de surface. Pour la recherche de cette valeur, plusieurs définitions de Weber ont été testées dans les simulations : $\langle We_{gt} \rangle_n$, $\langle We_{gt} \rangle_v$, $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$. Pour rappel, les informations relatives à leurs définitions sont présentes section 11.2.2.

15.2.2.1. Weber d'équilibre basé sur le nombre de gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_n$

Le premier Weber employé, $\langle We_{gt} \rangle_n$, se base sur un ensemble de gouttes en accordant à toutes un poids numérique égal, équation (11.11). Ce nombre sans dimension est mesuré à partir des gouttes sortant du domaine numérique, dans les trois ensembles de gouttes suivants. Le premier ne concerne que les gouttes sortantes associées à chacun des paquets, $\langle We_{gt} \rangle_{n, \text{paquet}}$. Le deuxième collecte l'ensemble des gouttes sortantes présentes sur chacun des cycles, $\langle We_{gt} \rangle_{n, \text{cycle}}$, tandis que le dernier rassemble celles présentes sur l'ensemble de la simulation, $\langle We_{gt} \rangle_{n, \text{simu}}$. Ces représentations en fonction des taux d'atomisations respectifs permettent d'illustrer les valeurs finales atteintes par paquets, cycles et sur l'ensemble de la simulation, en fonction des avancements des processus d'atomisation, Figure 15.12.

Quel que soit le type de représentation, par paquets $\langle We_{gt} \rangle_{n, \text{paquet}}$ Figure 15.12a, par cycles $\langle We_{gt} \rangle_{n, \text{cycle}}$ Figure 15.12b, où sur l'ensemble de la simulation $\langle We_{gt} \rangle_{n, \text{simu}}$ Figure 15.12c, les valeurs de ce Weber d'équilibre sont proches de l'unité. Ce comportement s'explique par la présence majoritaire, en nombre, de petites gouttes qui possèdent une faible inertie et sont rapidement mises à l'équilibre par l'écoulement gazeux.

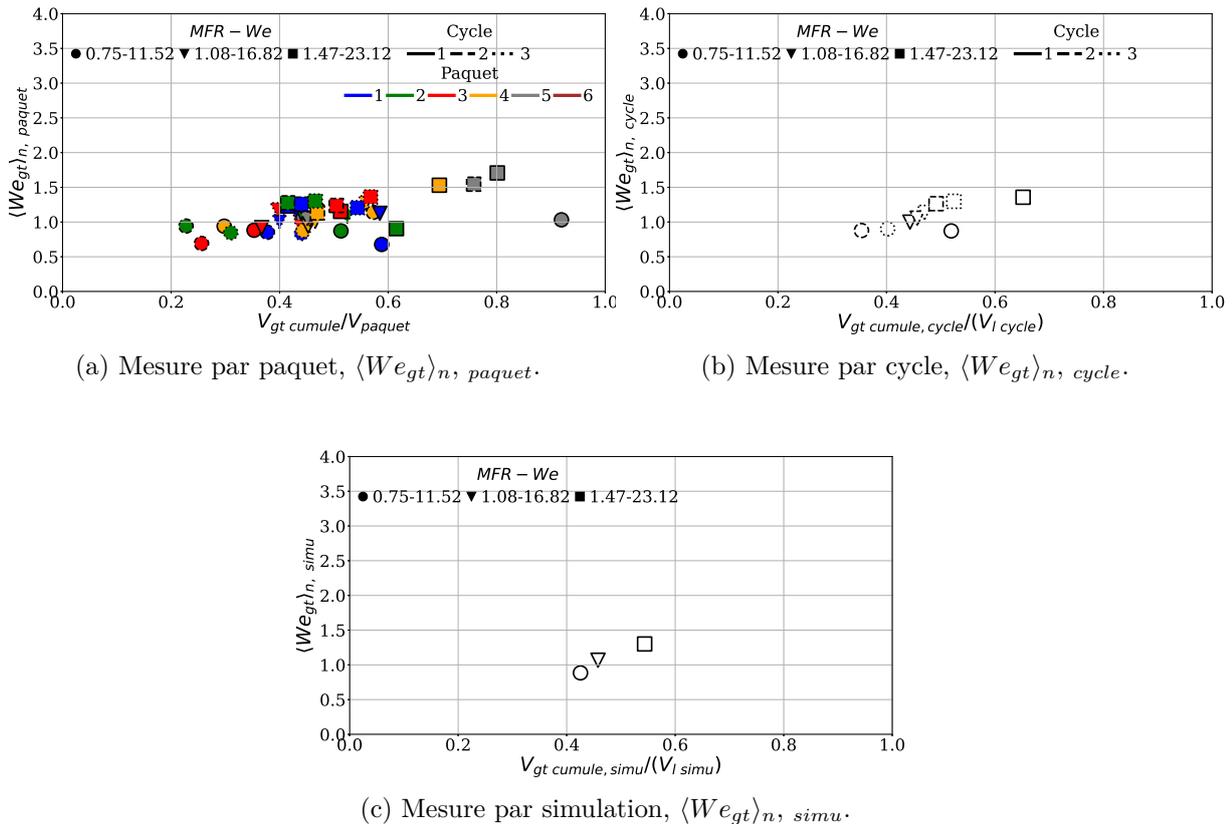


FIGURE 15.12. – Relevé des $\langle We_{gt} \rangle_n$ finaux en fonction des taux d'atomisation.

15.2.2.2. Weber d'équilibre pondéré par le volume de gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_v$

Le deuxième Weber employé, $\langle We_{gt} \rangle_v$ équation (11.12), illustre l'état énergétique du spray en s'appuyant sur le volume des gouttes sortantes. Le même raisonnement est appliqué par la suite

en mesurant ce Weber par paquet, $\langle We_{gt} \rangle_{v, \text{paquet}}$, par cycle, $\langle We_{gt} \rangle_{v, \text{cycle}}$, et sur l'ensemble de la simulation, $\langle We_{gt} \rangle_{v, \text{simu}}$, Figure 15.13.

Cette fois-ci, l'ensemble des paquets possède des valeurs de Weber supérieures à l'unité, Figure 15.13. Ce surplus de cisaillement est conservé dans la majorité des paquets générés, Figure 15.13a, mais aussi dans les moyennes par cycles, Figure 15.13b ainsi que sur l'ensemble de la simulation, Figure 15.13c.

La pondération par volume confirme le fait que le temps de relaxation des plus volumineuses gouttes est grand.

La valeur moyenne de ce nombre de Weber se positionne autour de 4 pour l'ensemble de la simulation. Le tracé par cycle et paquet ne montre pas de comportement particulier par rapport aux différents moments de l'atomisation de la nappe. Ce Weber moyen manifeste cependant encore une sensibilité à la vitesse de gaz cisailant.

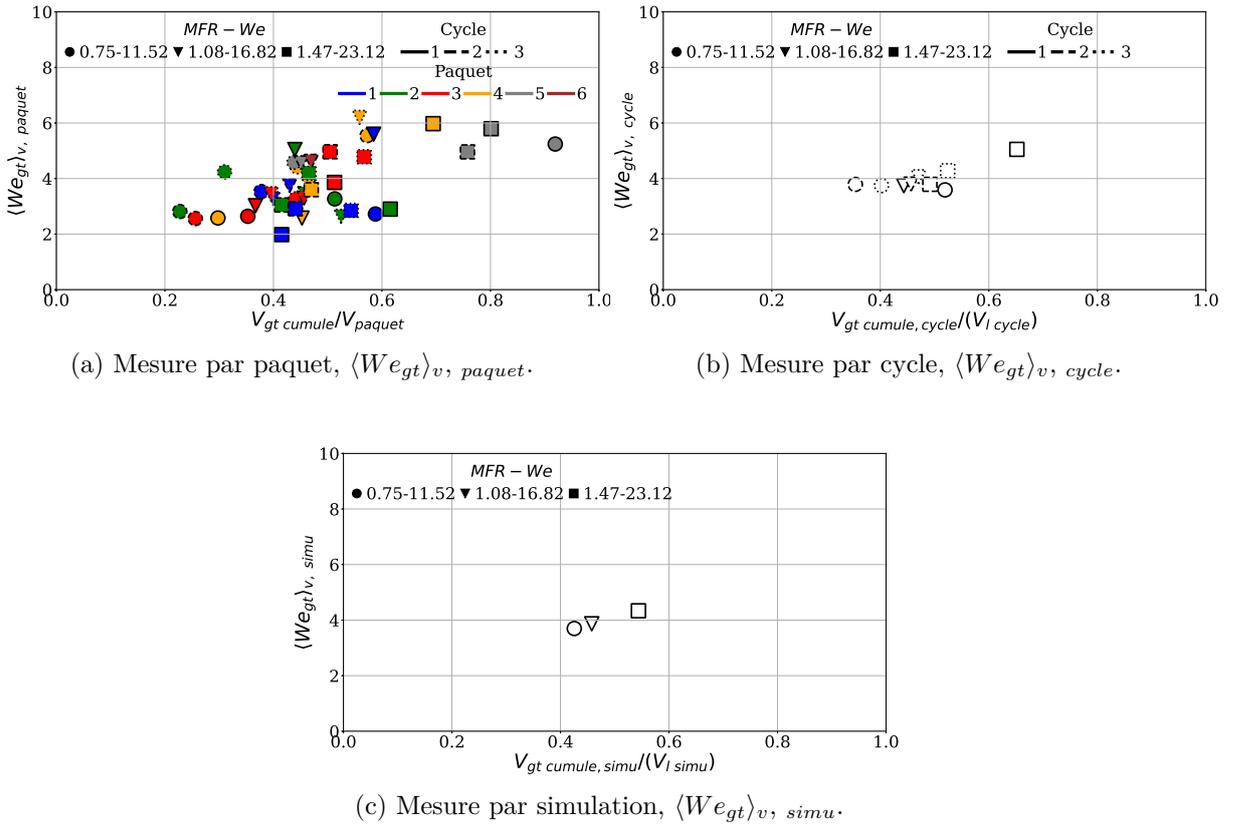


FIGURE 15.13. – Relevés des $\langle We_{gt} \rangle_v$ finaux en fonction des taux d'atomisation.

15.2.2.3. Weber d'équilibre basé sur le diamètre de Sauter des gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$

Le dernier des Weber, $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$ équation (11.22), utilisé dans cette analyse se base sur une modélisation du spray par son propre diamètre de Sauter équivalent. Ce Weber montre un comportement similaire au précédent et constitue donc une possible alternative pour l'estimation du Weber critique.

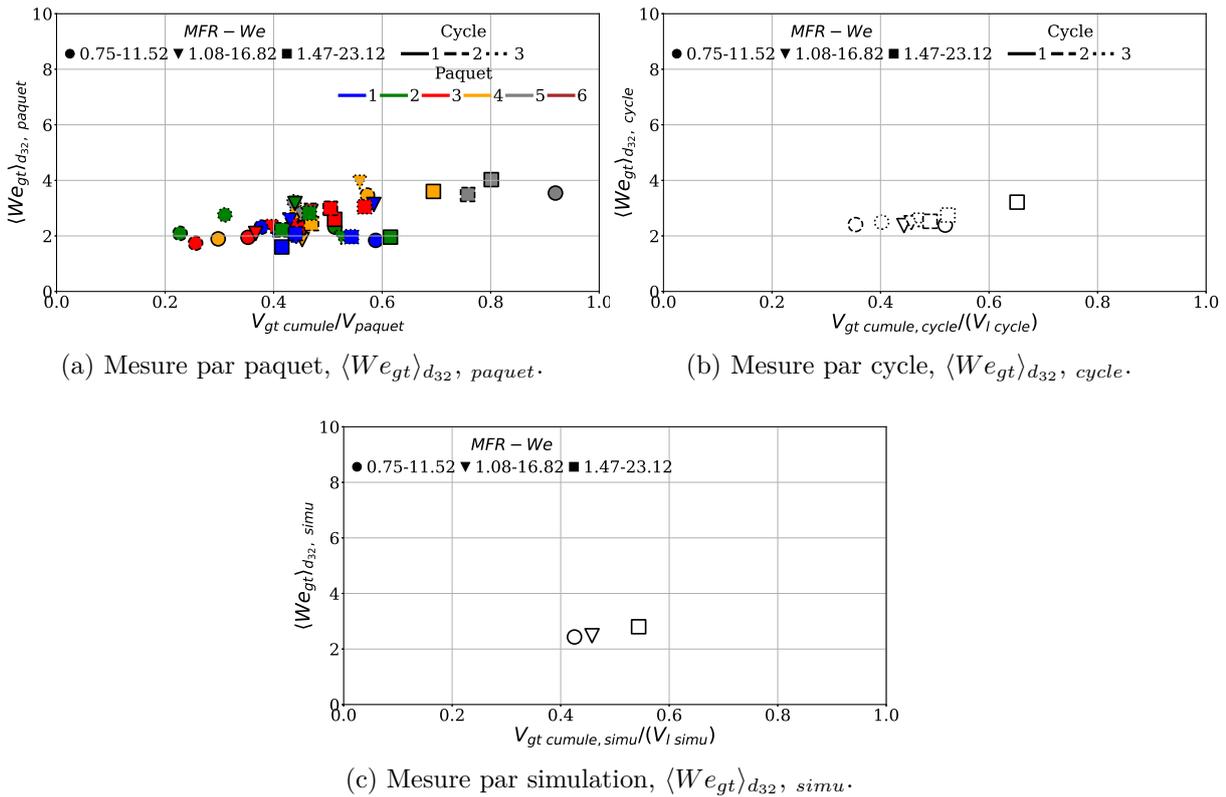
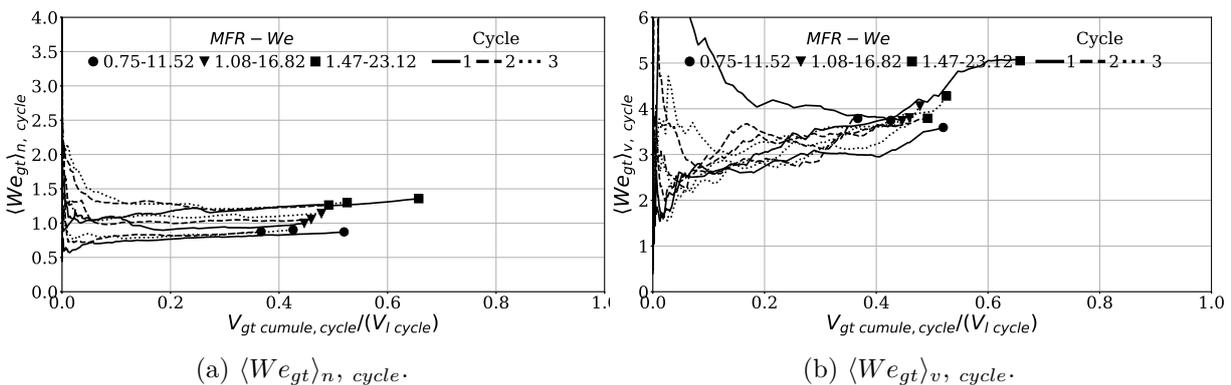


FIGURE 15.14. – Relevés des $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$ finaux en fonction des taux d'atomisation.

15.2.2.4. Corrélation des Weber d'équilibre

Pour chaque simulation, les évolutions des Weber d'équilibre ont été tracées en fonction des taux d'atomisation par cycle, Figure 15.15, ainsi que sur l'ensemble de la simulation, Figure 15.16.

La première représentation par cycle, Figure 15.15, démontre que les valeurs finales d'équilibre sont quasiment atteintes dès que les taux d'atomisation dépassent les 20 %. Un cycle étant composé de plusieurs paquets, ce comportement signifie que les processus d'atomisations (de ces paquets) génèrent des gouttes sortantes dont le cisaillement est analogue.



La seconde représentation utilise la totalité des gouttes générées pendant les cycles pour obtenir un comportement global de l'ensemble de la simulation, Figure 15.16. Le Weber moyenné par le nombre de gouttes illustre le surplus d'énergie à la phase liquide au-travers de ses variations en fonction des nombres sans dimension, Figure 15.16a. Les sprays sont composés d'un plus grand nombre de gouttes lorsque les nombres sans dimension augmentent et ces dernières deviennent plus énergétiques. Ce type de comportement se retrouve dans les moyennes pondérées par le volume, Figure 15.16b, et celles employant la modélisation du diamètre de Sauter, Figure 15.16c. D'autre part, cette représentation confirme le peu d'oscillations des Weber d'équilibre finaux en

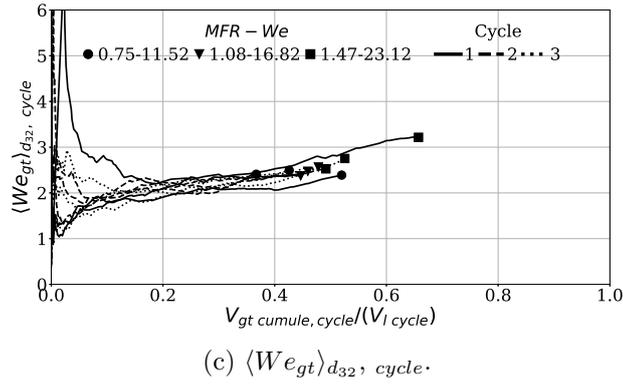


FIGURE 15.15. – Évolution des Weber d'équilibre en fonction des taux d'atomisation par cycle.

fonction des cycles ainsi que des taux d'atomisation. Cela signifie que les valeurs finales obtenues ne sont que peu influencées par les taux d'atomisations finaux atteints. Les contraintes générées sur l'atomisation du liquide par les conditions limites couplées à la proximité de leurs parois ne semblent pas altérer la façon dont le liquide se fragmente. À l'inverse, un élargissement de cette dimension doit permettre d'obtenir des taux d'atomisation plus élevés mais n'influencera pas le processus de génération de gouttes, leurs cisaillements ainsi que les valeurs de Weber qui y sont associées.

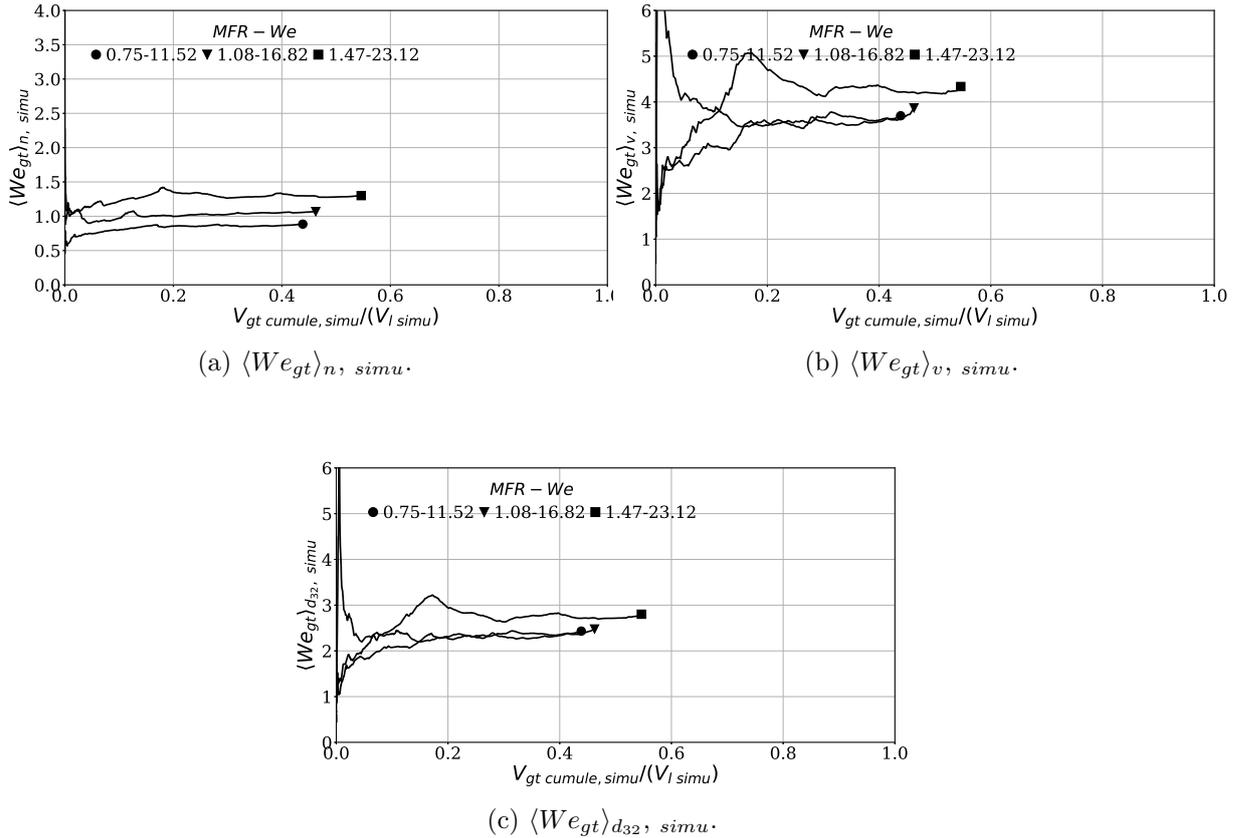


FIGURE 15.16. – Évolution des Weber d'équilibre en fonction des taux d'atomisation par simulation.

Une modélisation des Weber finaux a été réalisée en s'inspirant de l'étude des nappes périodiques, section 11.2.3.2. Pour cela, les valeurs finales recueillies ont été normalisées par le Weber des conditions initiales et le paramètre D employé pour la corrélation du diamètre de Sauter, section 15.1.3.

$$\begin{cases} \langle We_{gt} \rangle_n^*, simu = \langle We_{gt} \rangle_n, simu / We^{1-D} \\ \langle We_{gt} \rangle_v^*, simu = \langle We_{gt} \rangle_v, simu / We^{1-D} \\ \langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}^*, simu = \langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}, simu / We^{1-D} \end{cases} \quad \text{avec } D = 0.47 \quad (15.5)$$

Cette normalisation rassemble les évolutions des Weber d'équilibre dans des intervalles de valeurs réduits, Figure 15.17. Ainsi ces évolutions peuvent être modélisées, en première approximation, par une constante E .

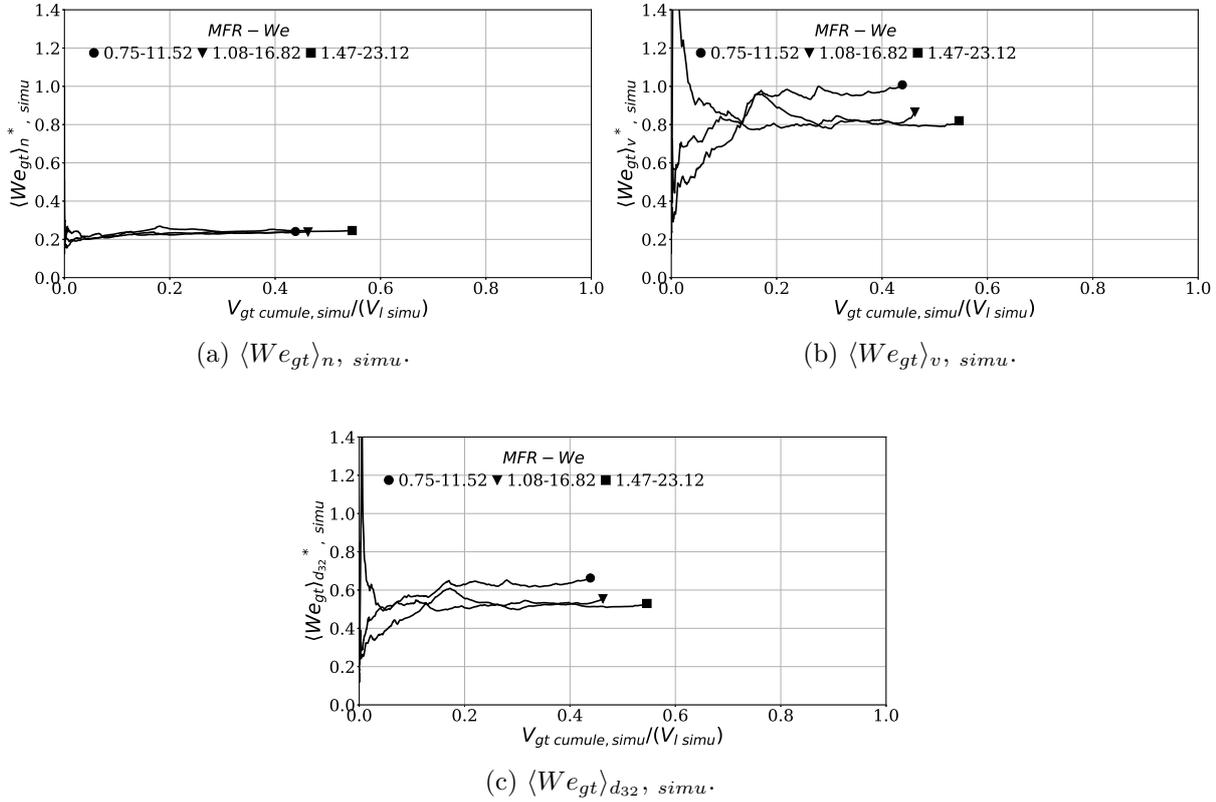


FIGURE 15.17. – Évolution des Weber d'équilibre normalisés en fonction des taux d'atomisation par simulation.

Les valeurs de ces constantes E , estimées à partir des valeurs finales des Weber des simulations, sont résumées Table 15.2.

	$\langle We_{gt} \rangle_n^*, simu$	$\langle We_{gt} \rangle_v^*, simu$	$\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}^*, simu$
E	0.25	0.9	0.6

TABLE 15.2. – Constantes représentatives des Weber d'équilibres normalisés.

Grâce à cela, une estimation des Weber d'équilibre est possible en inversant ces normalisations, équation (15.6).

$$\begin{cases} \langle We_{gt} \rangle_n, simu = EWe^{1-D} \\ \langle We_{gt} \rangle_v, simu = EWe^{1-D} \\ \langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}, simu = EWe^{1-D} \end{cases} \quad \text{avec } D = 0.47 \quad (15.6)$$

Cette formulation relie donc la valeur du Weber d'équilibre à celle du nombre sans dimension calculé à partir des conditions initiales. Les valeurs d'équilibre associées aux points de fonctionnement étudiés sont résumées Table 15.3.

We	$\langle We_{gt} \rangle_n, simu$	$\langle We_{gt} \rangle_v, simu$	$\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}, simu$
11.52	0.91	3.29	2.19
16.82	1.12	4.02	2.68
23.12	1.32	4.76	3.17

TABLE 15.3. – Valeurs des Weber d'équilibre en fonction des conditions initiales.

15.2.3. Conclusion

L'objectif de cette section était d'estimer les paramètres fondamentaux du modèle d'atomisation LES de l'approche à densité d'interface Chesnel [35], au moyen d'une approche phénoménologique dans le cas particulier d'une nappe liquide cisailée en régime "stretched ligament". Ces paramètres sont le temps caractéristique ainsi que la mesure d'un Weber d'équilibre.

Dans cette approche phénoménologique, le temps caractéristique est mesuré comme la durée entre le détachement d'un paquet liquide et la génération de sa dernière goutte dite sortante. De cette manière, ce temps caractéristique est estimé par paquet, par cycle puis par simulation. Malgré la difficulté de générer des statistiques suffisamment convergées, la majorité des relevés est proche d'une valeur centrale, $\tau_{eq}^* \approx 6$. Cette constante est confirmée par les moyennes plus générales par cycles et sur l'ensemble de la simulation qui oscillent autour de cette valeur. Ce comportement signifie que le temps d'équilibre, associé à chacune des simulations, n'est fonction que des conditions initiales et de ses nombres sans dimension. L'un des facteurs limitant cette étude est la taille du domaine de calcul : en effet, une quantité importante de liquide quitte le domaine sans avoir encore été atomisée.

Plusieurs définitions de Weber sont reprises de l'étude périodique section 11.2.2 et décrivent l'intensité du cisaillement en fonction de diverses considérations. Toutes ces définitions de Weber sont mesurées en plusieurs étapes : par paquet, par cycle et enfin moyennées sur l'ensemble de la simulation. Ces différents Weber fournissent plusieurs renseignements sur les sprays. Tout d'abord, ces derniers sont majoritairement composés en nombres de petites gouttes, à faible inertie, qui sont rapidement mises à l'équilibre par l'écoulement. Les plus volumineuses gouttes subissent un plus grand cisaillement de par leur plus grande dimension, et d'un temps de relaxation plus important. La contrainte, présente dans la détermination du temps d'équilibre, se retrouve dans cette analyse du Weber d'équilibre. Les taux d'atomisation n'atteignent pas l'unité en raison des contraintes de la taille du domaine. Pour cette raison, une analyse de ces Weber en fonction de l'évolution des taux d'atomisation a été réalisée. Cette dernière a démontré le peu d'influence de la valeur finale des Weber d'équilibre sur le taux d'atomisation, validant ainsi les précédentes valeurs. De plus, une modélisation de ces dernières a été réalisée en transposant la méthodologie employée dans les nappes périodiques. Cette dernière donne des résultats qualitativement corrects et permet en première approximation de modéliser les valeurs du Weber d'équilibre en fonction des conditions initiales.

15.3. Conclusion à propos de l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine réaliste

Plusieurs objectifs étaient visés dans ce chapitre. Le premier était d'analyser le comportement qualitatif et quantitatif des nappes liquides cisailées par rapport aux expériences de référence. Pour cela plusieurs mesures telles que la longueur de rupture, la mesure de fréquence de battement ainsi que celle du diamètre de Sauter ont été réalisées. Toutes ces mesures sont en accord, du moins qualitativement, avec les expériences de référence. La simulation à travers une similitude de nombres sans dimensions pertinents a montré l'importance de ces derniers, sans pourtant permettre de prédire le résultat de l'atomisation exclusivement à l'aide de ceux-ci. En effet, des écarts subsistent entre la simulation et l'expérience laissant supposer que tous les phénomènes ne sont pas entièrement pris en compte par les seuls nombres sans dimension conservés. D'autre part, une formulation du diamètre de Sauter en fonction du Weber, issue des nappes périodiques, s'est correctement adaptée dans cette nouvelle configuration. Cela renforce la première analyse tirée des simulations de ces nappes ainsi que les observations faites sur le découplage des phénomènes liés aux nombres sans dimension.

Le second objectif concernait l'estimation des paramètres d'un modèle d'atomisation assistée de type LES se basant sur les approches d'aires interfaciales. Dans une approche phénoménologique, le temps d'équilibre a été estimé à partir des taux d'atomisation obtenus sur l'ensemble des simulations et à l'aide de la normalisation temporelle issue des nappes périodiques. Le dernier paramètre est le Weber critique qui, en s'inspirant des nappes périodiques, est mesuré sur ces gouttes sortantes. La même méthodologie d'analyse que pour le temps d'équilibre a été transposée en s'intéressant aux résultats par simulation. Une représentation des évolutions de ces Weber en fonction des taux d'atomisation a été réalisée. Ces dernières ont démontré les faibles variations d'évolution de ces Weber lorsque les taux d'atomisation s'élevaient. Ce comportement rend pertinentes les valeurs finales mesurées et, suite à cela, une modélisation analogue à celle de l'étude périodique a été réalisée. Cette dernière a permis de valider les valeurs finales de Weber d'équilibres et d'obtenir leur modélisation en fonction des conditions initiales et du Weber initial.

Conclusion générale

Contexte des travaux

Cette thèse s'inscrit dans la dynamique actuelle de réduction des émissions des polluants liées au trafic aérien. Pour atteindre ce but, le contrôle de l'injection du carburant et la connaissance de son atomisation sont déterminants. Pour obtenir des simulations réalistes des systèmes d'injection industriels, tout en prenant en compte l'atomisation primaire, l'ONERA a développé une procédure de type « multi-échelles » (LSS) utilisant un solveur à phases séparées et dispersées. Le premier s'occupe de résoudre le cœur liquide (zone proche de l'injecteur) tandis que le second, utilisant un modèle stochastique lagrangien, décrit le brouillard issu de la pulvérisation (zone loin de l'injecteur). Ces deux modèles étant adaptés à des gammes d'échelles spatiales différentes, un modèle de couplage pour le transfert et la compatibilité des informations entre les différentes échelles est nécessaire.

Cette méthodologie, appelée LSS (Large Scale Simulation), nécessite une modélisation de type sous-maille des caractéristiques des gouttes, car le solveur à phases séparées (LES) n'est pas supposée résoudre l'écoulement jusqu'à cette taille.

Récapitulatif des travaux réalisés

Dans ce contexte, l'objectif final de cette thèse est de contribuer à la compréhension des phénomènes d'atomisation, et à progresser vers le développement d'un modèle sous-maille de densité d'interface (Σ) permettant de récupérer les informations topologiques perdues par le maillage dans les simulations de type LES.

Plusieurs étapes ont été nécessaires pour l'atteindre. Tout d'abord, une revue de ces modèles a été effectuée pour comprendre leurs constructions ainsi que la signification de leurs paramètres fondamentaux (τ_{eq} , We_{eq}). Une approche phénoménologique a été retenue pour dimensionner ces termes puisque les phénomènes reliés à la turbulence sont supposés secondaires dans le déroulement de ce type d'atomisation. Cette approche implique que les paramètres fondamentaux du modèle ne reposent que sur les propriétés dynamiques des structures liquides émises.

Les paramètres fondamentaux d'un modèle de densité d'interface sont le temps de mise à l'équilibre (τ_{eq}) et le Weber d'équilibre (We_{eq}). Ce temps caractéristique illustre la durée nécessaire aux structures liquides pour atteindre un état stable, sans changement topologique. Le Weber d'équilibre représente l'état de cisaillement des structures liquides en fin d'atomisation, primaire et secondaire.

L'étape suivante a été d'étudier l'influence de la conservation de certains nombres sans dimension, jugés les plus pertinents, sur le processus d'atomisation. Pour cela, des études en similitude avec la riche base de données expérimentales de l'ONERA ont été effectuées. Un régime d'atomisation de type ligamentaire a été ciblé puis reproduit via la simulation (en similitude) sur différentes configurations, validant ainsi le choix de ces nombres.

Un algorithme de détection liquide fut implémenté dans DYJEAT et ALGODETECT pour analyser chacune des structures liquides présentes dans une simulation d'atomisation. Son fonctionnement repose sur une propagation de balises dans chacune des cellules appartenant à une même structure (CCL) avec une précision sous-maille. Cela permet de récupérer des informations locales et intégrales sur chacune des structures présentes dans la simulation. Enfin, une validation fut réalisée sur un ensemble de cas test avec des mesures de ses performances HPC.

Avec l'aide de ce nouvel outil d'analyse, la configuration simplifiée mais pertinente d'atomisation de nappes liquides par cisaillement fut étudiée. Ce type d'atomisation fut inspecté dans deux configurations d'études complémentaires : la nappe liquide cisailée dans un domaine périodique puis celle réaliste avec la prise en compte d'un injecteur.

L'atomisation dans un domaine périodique implique de fortes hypothèses simplificatrices mais conserve les principaux phénomènes dirigeant ce processus. Cette dernière a permis de reproduire

le régime d'atomisation voulu ainsi que de réaliser de nombreuses études variationnelles sur des paramètres géométriques (Δ , L_y) ainsi que des nombres sans dimension initiaux ($MFR-We$, $\hat{\rho}$, We , MFR).

Dans cette configuration périodique, la réduction de la taille de maille augmente le temps caractéristique de rupture des structures liquides, ce qui favorise les coalescences forcées et pénalise le processus d'atomisation. A contrario, la hauteur du domaine n'a que peu d'influence sur ce dernier. Ce paramètre doit être suffisamment grand pour permettre à la longueur d'onde initiale de se fragmenter correctement.

Suite à cela, les modifications comportementales des caractéristiques de l'atomisation, induites par les variations des nombres sans dimension initiaux ($MFR-We$), ont été constatées en accord avec la base de données expérimentales de l'ONERA. L'augmentation de l'énergie accordée à la phase gazeuse favorise l'atomisation au-travers de plusieurs indicateurs : un nombre de gouttes produites croissant, un meilleur taux de conversion en gouttes, une réduction du diamètre de Sauter, etc.

Toutefois, de fortes dépendances existent entre ces nombres retenues, c'est pourquoi de nouvelles études d'influence découplées ont été menées ($\hat{\rho}$, We , MFR). Cela a permis d'enrichir les analyses expérimentales et de mettre en évidence l'influence séparée de certains nombres sans dimension sur des caractéristiques précises de l'atomisation.

Dans cette configuration d'étude périodique, le We ne semble piloter que la production de surface au-travers de la génération des gouttes, leurs répartitions en volume et les diamètres caractéristiques qui en découlent. Le MFR n'agit que sur le temps caractéristique du processus d'atomisation, qui pour rappel, n'est produit qu'à partir d'une longueur d'onde précise.

Fort de tous ces résultats, les paramètres fondamentaux du modèle de densité d'interface ont pu être estimés, sous la nouvelle hypothèse de faible influence des conditions limites périodiques. Une corrélation comportementale estime un temps de mise à l'équilibre des gouttes générées ne dépendant que du MFR . Une opération supplémentaire de réjection des gouttes les plus volumineuses a été nécessaire afin de minimiser le biais induit par les conditions limites sur l'estimation du Weber d'équilibre. Plusieurs Weber caractéristiques ont été construits en fonction des considérations sur le spray voulu ($\langle We \rangle_n$, $\langle We \rangle_v$, $\langle We \rangle_{d_{32}}$). Une nouvelle corrélation a permis de n'exprimer ces Weber caractéristiques qu'en fonction d'une constante et du We initial, rendant accessible le Weber d'équilibre. L'obtention du temps d'équilibre et du Weber d'équilibre en fonction des conditions initiales de la simulation complète ce premier modèle de densité d'interface.

La seconde configuration d'étude concerne la nappe cisailée avec la prise en compte d'un injecteur. Cette configuration, bien plus coûteuse que son homologue périodique, simule l'atomisation d'un liquide depuis son injection et jusqu'à sa sortie du domaine. Des points d'analyses similaires furent mis en place dans l'étude de ces nappes, bien que les phénomènes internes soient plus nombreux et complexes. Une première simulation fut réalisée en similitude pour vérifier si le régime d'atomisation était bien ligamentaire dans cette nouvelle configuration géométrique. Avec l'aide des bases de données générées par l'algorithme de détection liquide, un nouveau suivi Lagrangien fut construit pour reconstruire l'atomisation des structures liquides par paquets d'émissions. Cette opération bâtit une nouvelle base de données, dite ordonnée, dans laquelle chaque structure est référencée par un numéro unique et dans laquelle ses propriétés topologiques et dynamiques sont accessibles durant sa durée d'existence. Pour conserver l'information d'appartenance des structures à un paquet d'émission, un historique de création des structures fut réalisé. Ce dernier conserve l'affectation d'une structure à un paquet d'émission indépendamment du nombre de coalescences ou de ruptures que cette dernière subit. Cette procédure permet le suivi de l'atomisation des paquets, indépendamment les uns des autres.

De plus, pour se rapprocher des mesures expérimentales, des analyses ont été effectuées sur les gouttes finales des paquets (désignées comme sortantes). Ces dernières, non sujettes à une atomisation secondaire, constituent un échantillon d'analyse cohérent par rapport à ceux sur lesquels se basent les mesures expérimentales. Des analyses par paquets, par cycles ainsi que sur l'ensemble de la simulation ont démontré des valeurs atteintes pour le diamètre de Sauter comparable avec l'expérience, en dépit d'un écart constant toujours présent.

Toute cette procédure d'analyse fut transposée à l'étude portant sur l'influence des changements de paramètres géométriques : la résolution (Δ) et l'allongement longitudinale du domaine (L_x). Cela a mis en évidence l'effet préjudiciable de l'augmentation de résolution sur la fragmentation des structures dans un domaine trop restreint. D'une manière similaire à l'étude périodique analogue, l'augmentation de la résolution augmente les temps caractéristiques de rupture des structures. Dans un domaine géométrique fixe cela signifie un déplacement plus important, parfois supérieur aux limites du domaine.

À l'opposé, l'allongement du domaine permet au processus d'atomisation de se développer pleinement puisque les structures ont plus d'espace et de temps pour leur fragmentation. Cela se traduit par un nombre de gouttes ainsi que des taux de conversion en gouttes croissants.

Suite à cela, des études variationnelles se basant sur les nombres *MFR-We* furent menées pour vérifier si les variations comportementales de l'atomisation étaient en accord avec les points d'expérience reproduits en similitude. Cette étude fait écho à celle réalisée en configuration périodique et conforte les conclusions précédentes. L'augmentation de l'apport d'énergie de la phase gazeuse accroît la production de gouttes, les taux de conversion en gouttes et agit sur diamètre de Sauter en abaissant sa valeur.

Les travaux sur cette configuration se sont poursuivis par une comparaison des grandeurs caractéristiques de l'atomisation avec l'expérience. La première fut la longueur de rupture dont les mesures sont cohérentes avec les mesures expérimentales. Suite à cela, le battement fréquentiel de la nappe a été investigué, en décomposant cette analyse en deux zones : une proche de l'injecteur (sans rupture liquide de la nappe) et l'autre éloignée (avec rupture). La fréquence dominante dans la zone éloignée n'est reliée qu'aux ruptures de la nappe puisque la valeur de cette dernière ne varie pas en fonction des nombres sans dimension. Celles proches de l'injecteur augmentent avec ces nombres sans dimension et sont en accord avec les mesures expérimentales. La dernière grandeur caractéristique de l'atomisation est le diamètre de Sauter dont les relevés illustrent des variations en accord avec l'expérience. Bien qu'un écart soit conservé, une modélisation s'inspirant des travaux en configuration périodique est réalisée. Cette dernière, ne dépendant que du Weber initial, se transpose correctement sur les mesures de référence.

Le dernier point d'étude concerne l'estimation des paramètres du modèle de densité d'interface (similaire à celui de l'étude périodique) à partir des résultats obtenus dans cette configuration. Le temps d'équilibre est caractérisé par rapport à l'avancement de l'atomisation des paquets, des cycles et de l'ensemble de la simulation. L'adimensionnalisation temporelle est identique à celle employée dans les études périodiques, c'est pourquoi la corrélation obtenue est similaire. De plus, les valeurs dimensionnelles obtenues sont analogues aux temps de convections. Cela signifie que la longueur longitudinale n'est pas suffisamment grande pour permettre une atomisation complète.

Les Weber caractéristiques de l'étude périodique sont transposés dans cette configuration. Des relevés par paquets, par cycles ainsi que sur l'ensemble de la simulation illustrent un comportement analogue à l'étude périodique. Pour cette raison, une corrélation similaire se basant sur le Weber initial, y a été bâtie. Cette dernière permet d'obtenir une modélisation de ce Weber d'équilibre en fonction des conditions initiales de la simulation.

Discussion et perspective

L'utilisation de ces deux configurations d'études permet d'effectuer des premières analyses, d'établir des corrélations, sur la configuration simplifiée puis de les valider, ou non, avec celles plus réalistes.

Grâce à son coût réduit, la configuration périodique permet de réaliser de multiples études paramétriques et ainsi d'explorer de nombreux axes de recherche. Toutefois, l'exploitation de ces résultats est relativement limitée par le biais induit des conditions limites. En effet, une trop fine résolution ainsi qu'un temps de simulation trop long favorisent les coalescences forcées entre les structures liquides, ce qui est fortement préjudiciable dans cette approche phénoménologique.

La configuration réaliste offre une multitude de résultats exploitables et comparables aux expériences. Toutefois, la présence simultanée de paquets liquides dans des états d'avancement

d'atomisation différents nécessite une procédure d'analyse adaptée. De plus, plusieurs facteurs pénalisent l'atomisation des paquets liquides dans le domaine : la longueur longitudinale trop restreinte ainsi que les conditions de glissement transversales rapprochées. Pour dépasser ces deux limitations, un plus grand nombre de processeurs doit être alloué, ce qui signifie un coût et un temps de restitution croissant et potentiellement prohibitif.

De nombreuses perspectives s'ouvrent suite à ces travaux.

Dans un premier temps, de nouvelles études paramétriques en configuration périodique peuvent être menées pour statuer sur l'influence de grandeurs initialement fixées comme constantes. Ainsi des études sur la longueur initiale, les paramètres de la vitesse initiale perturbatrice ainsi que les viscosités dynamiques peuvent être envisagés. Des analyses supplémentaires sont possibles sur les processus de fragmentation des gouttes. À l'aide du suivi Lagrangien le traçage des gouttes et de leurs historiques (ruptures et coalescences) est possible, ce qui peut améliorer la compréhension de ces phénomènes.

Toutes ces perspectives sont transposables à la configuration réaliste (nouvelles simulations, analyse des processus de fragmentation) avec un intérêt supplémentaire qui provient de sa plus grande représentativité à l'expérience.

Un nouvel axe de recherche pourrait être de fournir les bases de données (ordonnées et désordonnées) produites à des réseaux de neurones. Ces derniers pourraient être employés dans le cadre de la recherche de modèle pour la densité d'interface, de l'estimation des paramètres d'un tel modèle ou dans l'amélioration des processus de coalescences et de fragmentations.

Une première tentative a été réalisée avec l'aide de Jean-François Poustis, en parallèle des travaux de cette thèse, et s'est vite conclue devant toute l'étendue des possibilités réalisables.

Annexes

Compléments d'informations sur les études de nappe liquides cisailés dans un domaine périodique

Des informations supplémentaires sur l'atomisation de nappes liquides cisailées dans un domaine périodique sont disponibles dans cette annexe.

A.1. Analyse du cas de référence

A.1.1. Indicateurs globaux

La position verticale de toutes les gouttes détectées à chaque instant, y_{gt} est employée tel un indicateur global supplémentaire. Cette dernière est normalisée par rapport à la demi épaisseur initiale de la nappe $\alpha/2$. Cet indicateur illustre la rapide dispersion verticale des gouttes, Figure A.1, qui est confirmée sur les allures de l'interface liquide, Figure 8.4. En effet, les gouttes atteignent les extrémités verticales du domaine dès $t^* = 2$, soit bien avant la fin de l'atomisation des ligaments secondaires. Cette enveloppe des gouttes permet d'estimer un angle d'ouverture de spray, θ_{spray} , de l'ordre de 35° .

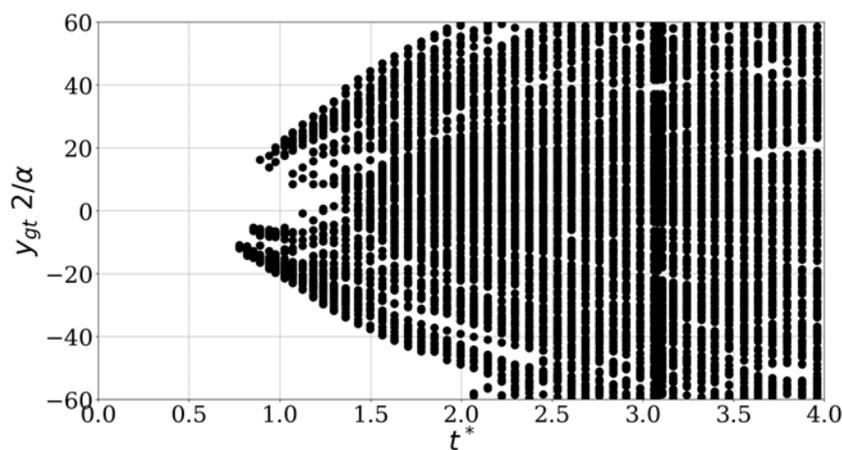


FIGURE A.1. – Position verticale des gouttes, cas de référence.

A.1.2. Indicateurs locaux

Le nombre de gouttes, n_{gt} , a été utilisé en fonction de deux types de distribution, d/Δ et $y 2/\alpha$, et du temps t^* .

Types de distribution	Grandeurs analysées
Taille, d/Δ .	Nombre des gouttes, n_{gt} .
Hauteur, $y/2\alpha$.	

La distribution du nombre de gouttes par diamètre illustre une forte concentration de petites gouttes dans le spray généré, Figure A.2. La majorité des gouttes sont concentrées dans des petites classes, $d/\Delta = 2$, dont le volume cumulé est négligeable au regard de celles présentes dans les catégories supérieures, Figure 8.8.

De plus, les nombreuses gouttes générées lors de rupture de membrane, $t^* \leq 1.5$, sont de petites tailles et ne contiennent qu'une part négligeable de liquide. Enfin, la présence de ces petites gouttes est conservée tout le long de la simulation puisque cette distribution évolue peu.

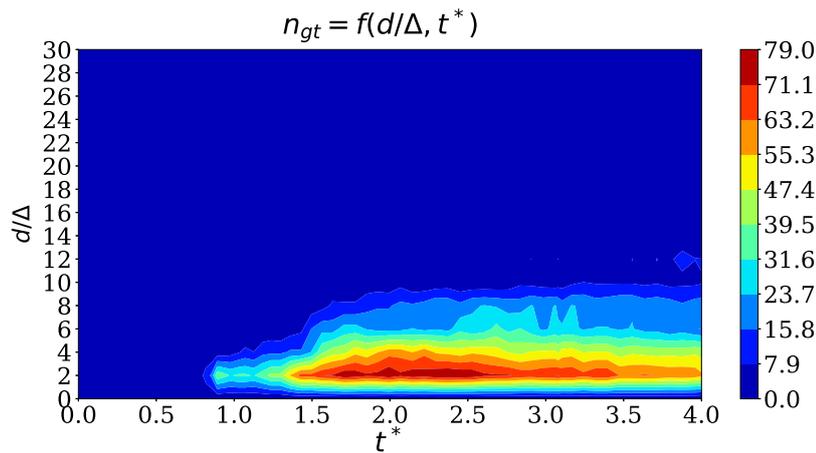


FIGURE A.2. – Distribution du nombre de gouttes par taille, cas de référence.

Le nombre de gouttes se répartit équitablement sur l'axe vertical avec une sur-concentration locale proche de l'origine, pour $t^* \approx 1.7$, Figure A.3. Cette dernière est causée par la rupture des filaments liquides reliant les deux parties de la nappe initiale et la rupture finale des ligaments, Figures 8.4a et 8.4b. Cette sur-concentration se diffuse légèrement dans la direction verticale durant le processus d'atomisation.

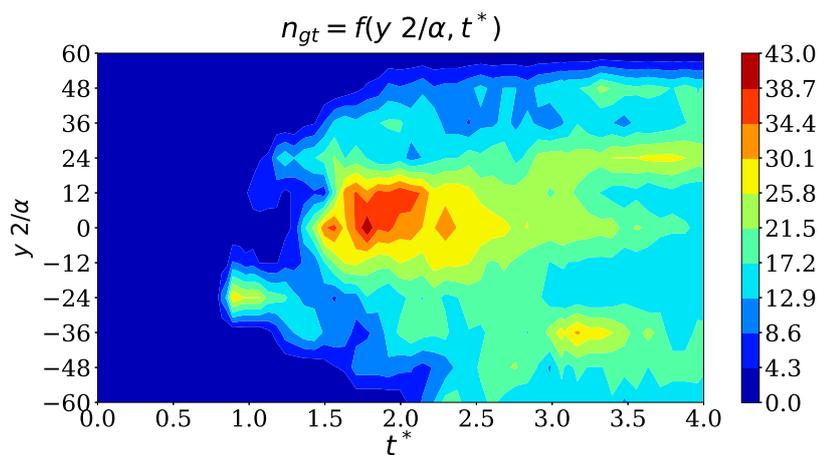


FIGURE A.3. – Distribution du nombre de gouttes par hauteur, cas de référence.

A.1.3. Diamètre caractéristique

En atomisation, plusieurs diamètres caractéristiques sont employés afin d'analyser les propriétés d'un spray. En plus du diamètre de Sauter, c'est le diamètre moyen, d_{10} , qui est employé, équation (A.1).

$$d_{10}(t) = \frac{1}{n_{gt}(t)} \sum_{i=1}^{n_{gt}(t)} d_{gt}(i, t) \quad (\text{A.1})$$

Ce diamètre accorde à chaque goutte détectée la même importance, le même poids numérique, Figure A.4. Or, dans cette étude, le spray analysé est fortement composé de petites gouttes de volume négligeable. Ceci impacte le diamètre moyen via une quasi-stagnation de son évolution ainsi qu'une valeur finale atteinte basse. Des relevés de ce diamètre sont résumés pour les deux instants t^*_{cmp} et t^*_{fin} , Table A.1.

	t^*_{cmp}	t^*_{fin}	
$d_{10}(\mu\text{m})$	271.4	313.5	$t^*_{cmp} = 2.5$ (A.2)
d_{10}/Δ	5.8	6.7	$t^*_{fin} = 4.0$ (A.3)

TABLE A.1. – Comparaison des diamètres de moyen, cas de référence.

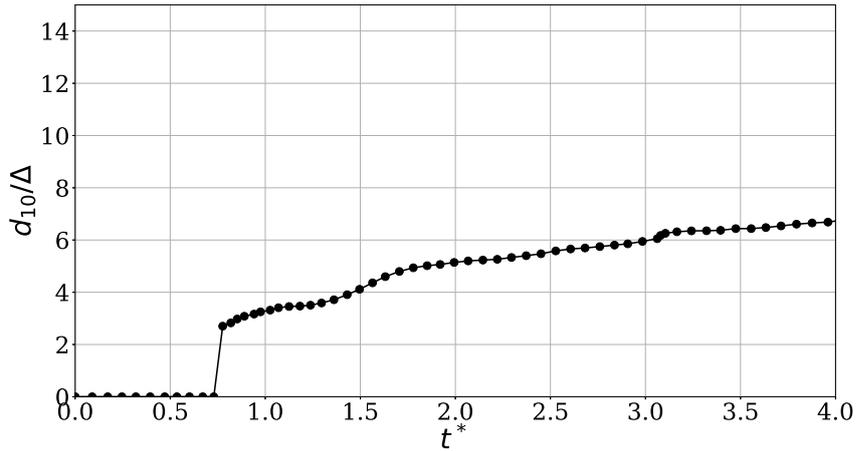


FIGURE A.4. – Diamètre moyen du spray, cas de référence.

A.2. Effet de la résolution, Δ

A.2.1. Indicateurs globaux

La position verticale de chacune des gouttes détectées à chaque instant, permet de représenter les ouvertures de sprays $y_{gt} 2/\alpha$, Figure A.5 dont les valeurs sont résumées Table A.2.

Les deux premières simulations possèdent un angle d'ouverture proche, a contrario de la dernière. Cet écart confirme un processus de génération des premières gouttes différent qui, à son tour, est représentatif d'une modification du déroulement des grandes échelles. Pour les deux premières simulations, ce processus se déroule lors de la rupture de membrane tandis que dans le dernier cas, cela se produit dans des zones à faibles rayons de courbures.

α/Δ	6.4	12.8	25.6
θ_{spray} ($^\circ$)	35	37	53

TABLE A.2. – Angles d'ouvertures de spray, effet de la résolution.

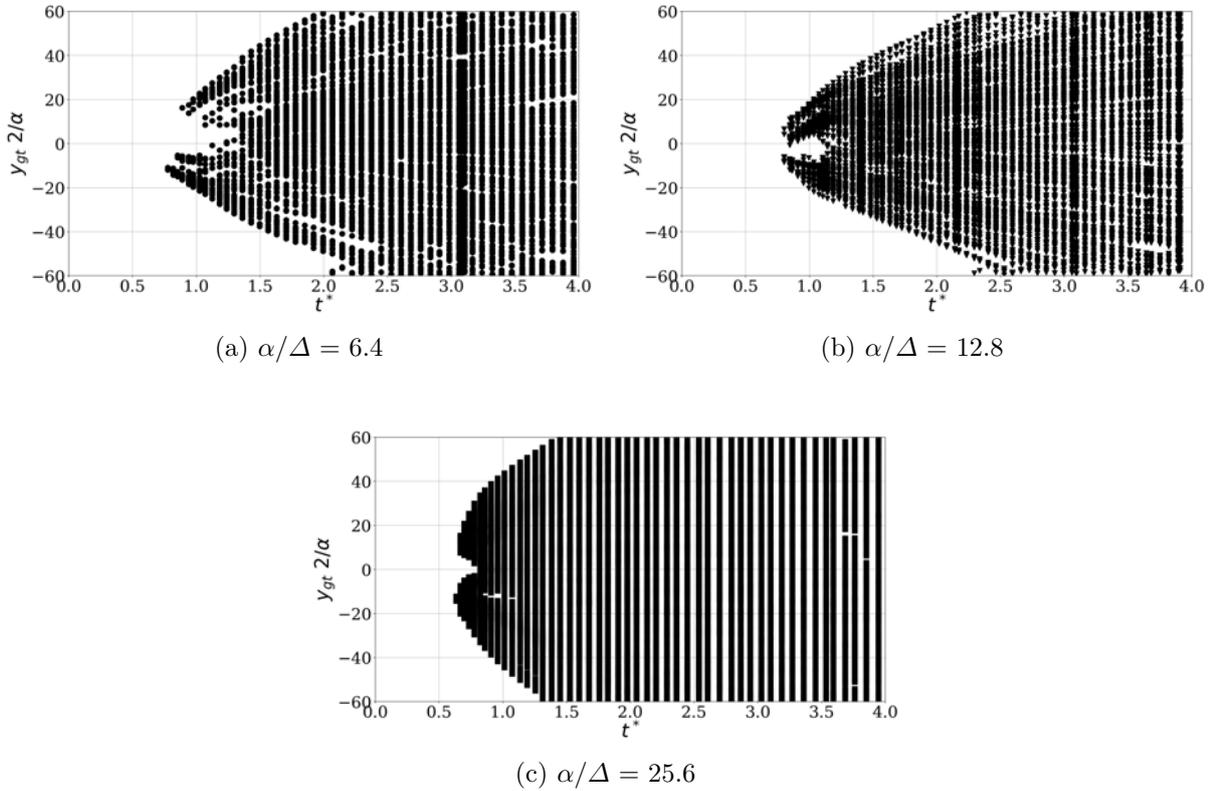


FIGURE A.5. – Position verticale des gouttes, effet de la résolution.

Le nombre de gouttes détectées, n_{gt} , démontre des taux de production de gouttes (pentes des courbes) varient fortement avec la résolution, Figure A.6. Une première décomposition en deux catégories peut être faite avec, d'un côté la plus résolue des simulations et de l'autre celles restantes. La première catégorie génère quasiment la totalité de ses gouttes très rapidement [t^*] ≤ 0.5 , à l'inverse de la seconde. Les deux autres simulations, requièrent plus du double de temps pour atteindre un résultat similaire, [t^*] ≥ 1 . Le sigle $[\cdot]$ désigne un intervalle.

Par ailleurs, la quantité de volume associée à cette production de gouttes n'est pas comparable. La première catégorie n'y associe que 5 % du volume de gouttes, pour un nombre quasiment maximal de gouttes générées à $t^* \approx 1$. À l'inverse de la seconde catégorie qui y associe un volume significativement plus important, entre 20 % et 30 %, à $t^* \approx 1.75$, Figures 9.5 et A.6.

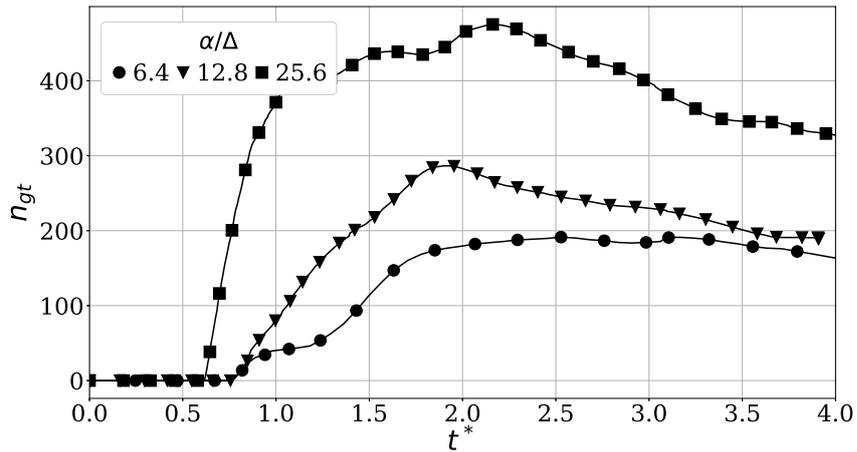


FIGURE A.6. – Nombre total de gouttes, effet de la résolution.

A.2.2. Indicateurs locaux

La distribution du nombre de gouttes détectées est influencée par les changements de résolution, Figure A.7d. Bien que les maximums se situent toujours dans les plus petites classes de diamètre, illustrant le caractère polydisperse du spray, les valeurs atteintes sont différentes. Cette valeur maximale grandit de 18.9 % entre les deux premières simulations, Figures A.7a et A.7b, puis de 123.4 % entre les deux dernières, Figures A.7b et A.7c. Cette variation brutale, visible Figure A.6, appuie l'hypothèse d'un changement de procédé de génération des premières gouttes pour la dernière simulation.

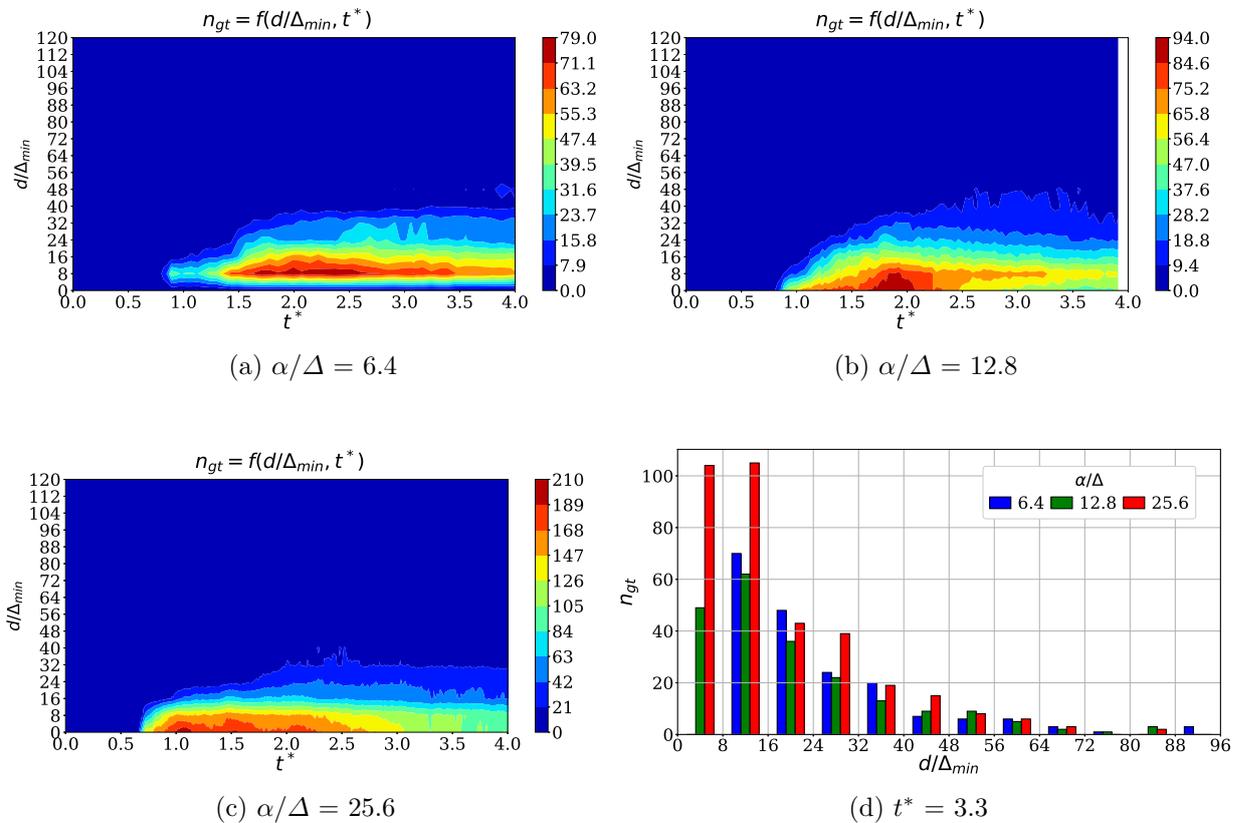


FIGURE A.7. – Distribution du nombre de goutte par taille, effet de la résolution.

La distribution du volume de gouttes par taille de diamètre est peu influencée par les changements de résolution, Figures A.8a A.8b et A.8c. Quel que soit la résolution employée, une forte concentration du volume de gouttes se retrouve dans un large intervalle situé entre $16 \leq d/\Delta_{min} \leq 72$. Toutefois, quelques différences de répartition de volume apparaissent en fin d'atomisation parmi les plus larges gouttes, $d/\Delta_{min} > 72$, avec des fluctuations de l'ordre de 5 %, Figure A.8d.

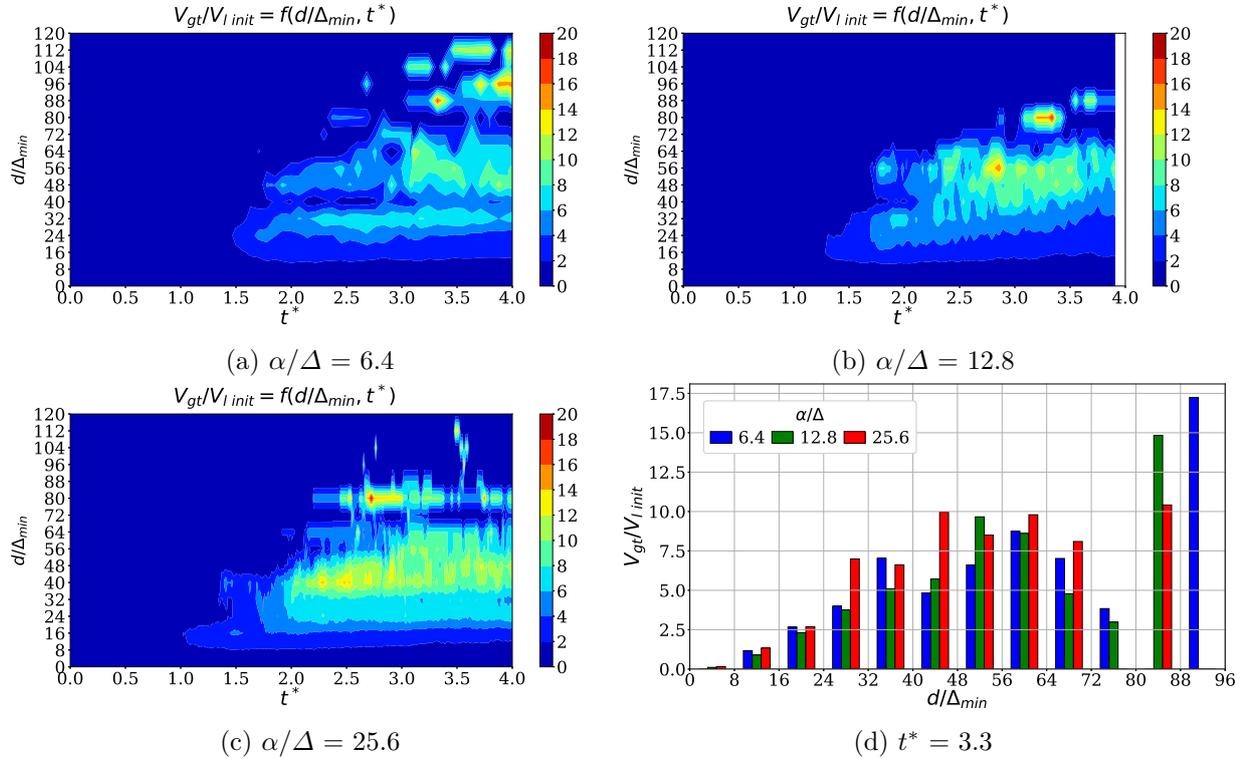


FIGURE A.8. – Distribution du volume de goutte par taille, effet de la résolution.

A.2.3. Diamètre caractéristique

Le diamètre moyen est impacté par les changements de résolution puisque son augmentation permet la résolution de structures et donc de gouttes plus petites, Figure A.9. Par exemple, pour une même quantité de volume de gouttes à $t^* = 1.7$ Figure 9.5, le nombre de gouttes grandit avec la résolution, Figure A.6. Ces fortes variations du nombre de gouttes modifient l'estimation du diamètre moyen dont les valeurs à $t^*_{cmp} = 2.5$ ainsi qu'en fin de simulation sont résumées Table A.3.

	t^*_{cmp}			t^*_{fin}		
	6.4	12.8	25.6	6.4	12.8	25.6
d_{10} (μm)	257.4	234	187.2	315.9	234	210.6
d_{10}/Δ_{min}	22	20	16	27	20	18

TABLE A.3. – Comparaison des diamètres moyens, effet de la résolution.

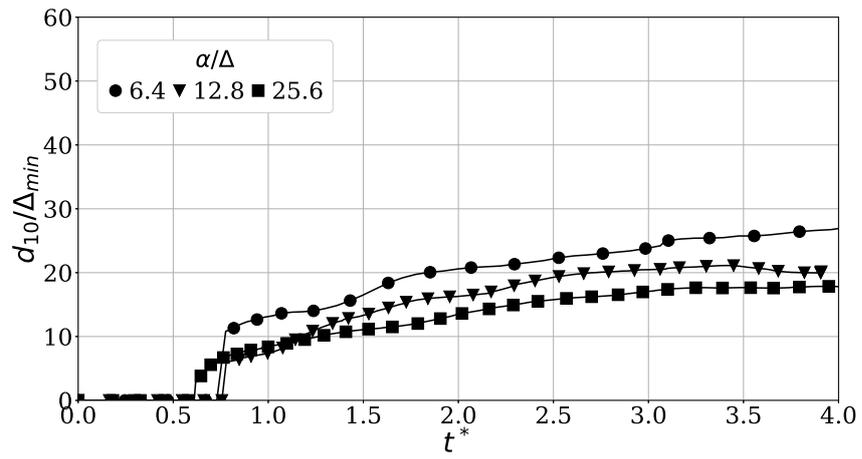


FIGURE A.9. – Diamètre moyen, effet de la résolution.

A.3. Influence du cloisonnement vertical, L_y

A.3.1. Indicateurs globaux

Les biais induits par les conditions limites périodiques sont visibles Figure A.10b. Quelques gouttes sont éjectées rapidement vers le bas et réapparaissent au sommet du domaine, pour $t^* = 1.75$. Ces gouttes, réintroduites par les conditions limites, vont recalescer et ainsi altérer la représentativité globale de la simulation.

Un angle de spray n'est pas identifiable pour la plus petite hauteur employée puisque les gouttes atteignent trop rapidement les extrémités verticales du domaine.

L_y (mm)		8	20
θ_{spray} (°)		-	40

TABLE A.4. – Angles d'ouverture de spray, influence de la hauteur.

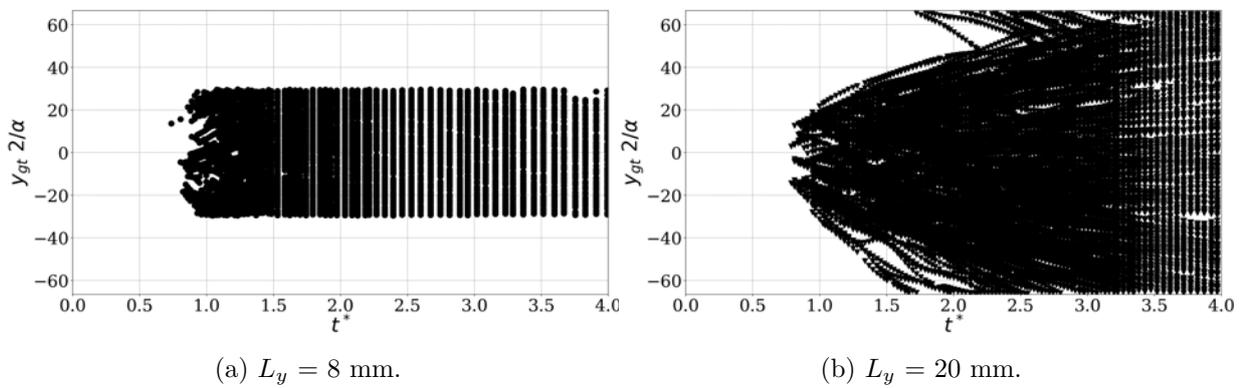


FIGURE A.10. – Positions verticales des gouttes, influence de la hauteur.

Le nombre de gouttes détectées renforce l'observation faite de comportement analogue durant la phase génératrice de surface. Durant cet intervalle, les taux de production de gouttes sont proches, impliquant des mécanismes de génération de gouttes similaires et ce malgré un écart maximal de 5 %, Figure A.11. Les dissemblances se manifestent lors de la phase de stabilisation du spray, $t^* \geq 1.6$ avec un maximum de gouttes détectées augmentant en fonction de la hauteur du domaine (210 à plus de 275 gouttes). D'autre part, les variations de hauteurs altèrent cette phase de stabilisation du spray puisque les taux de destruction des gouttes sont différents. Plus le domaine est réduit, plus ces taux de destruction sont amplifiés et apparaissent précocement.

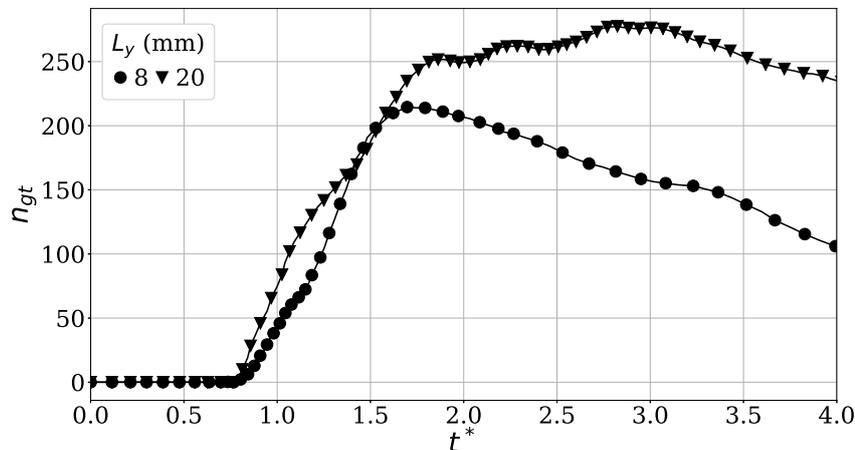


FIGURE A.11. – Nombre total de gouttes, influence de la hauteur.

A.3.2. Indicateurs locaux

La distribution du nombre de gouttes par taille de diamètre est influencée par les variations de hauteurs du domaine géométrique, Figure A.12b. En effet, le maximum local atteint chute de moitié, passant de quasiment 120 à 60, Figures A.12a et A.12b. D'autre part, le nombre de petites gouttes décroît beaucoup plus rapidement dans le cas confiné ($L_y = 8$ mm) que dans le cas étendu ($L_y = 20$ mm). Cela provient du cloisonnement vertical qui renforce les probables collisions entre structures avec l'aide supplémentaire des conditions limites, Figure A.12c.

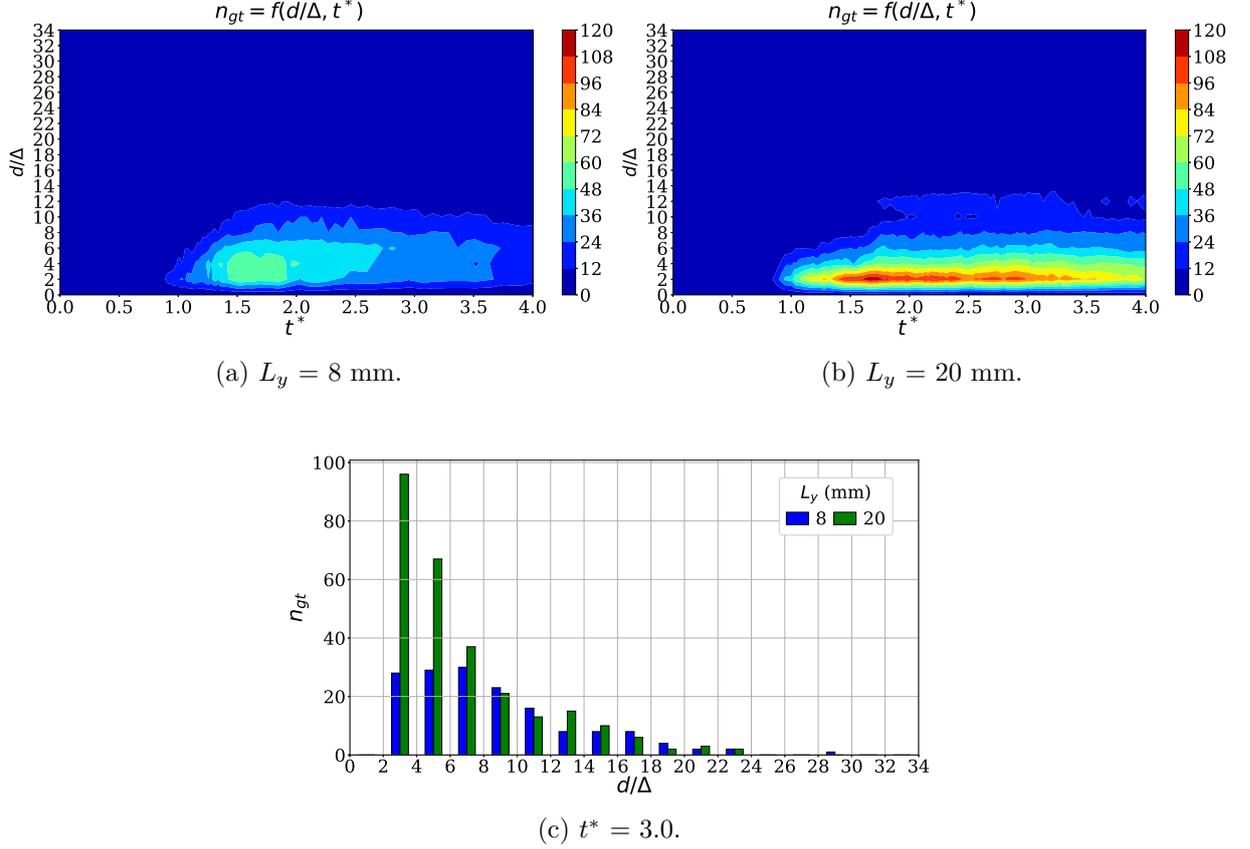


FIGURE A.12. – Distribution du nombre de gouttes par taille, influence de la hauteur.

La distribution du volume de gouttes par taille de diamètres est peu influencée par les variations de hauteur puisque la majorité du volume se concentre dans un large intervalle, $2 \leq d/\Delta \leq 24$, et en quantités similaires, Figure A.13. Cependant, une diminution de la hauteur augmente les probabilités de collision entre structures au sein d'un domaine périodique. Ceci a pour conséquence la création plus rapide de larges structures liquides ainsi que la détection précoce de larges gouttes $d/\Delta \geq 26$, Figure A.13a. Ainsi, une simulation étendue, restant soumise à ces mêmes effets, ne détecte ces larges gouttes que plus tardivement, Figure A.13b.

A.3.3. Diamètre caractéristique

Les évolutions du diamètre moyen sont toutes croissantes mais possèdent un écart s'agrandissant durant la simulation, Figure A.14. Ce dernier provient de la restriction de hauteur verticale qui augmente les probabilités de coalescence entre structures. Ces dernières ont plus de chances de se produire sur de petites gouttes du fait de leurs présences majoritaires au sein du domaine géométrique. Ceci a pour conséquence de réduire le nombre de petites gouttes par coalescences forcées, d'y générer de plus grosses et ainsi d'augmenter le diamètre moyen correspondant. Des relevés de mesures pour $t^*_{cmp} = 2.5$ ainsi qu'en fin de simulation sont résumés Table A.5 et illustrent cet écart grandissant.

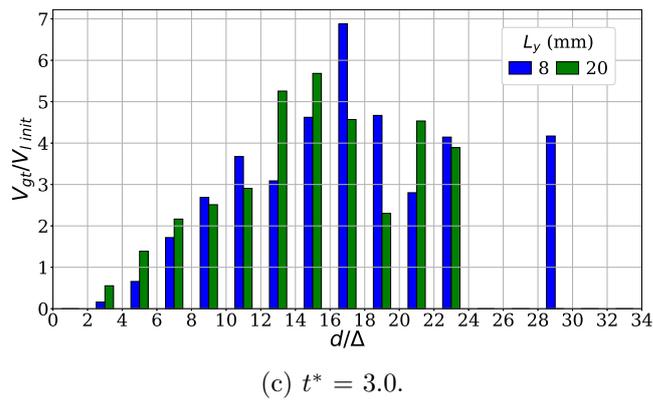
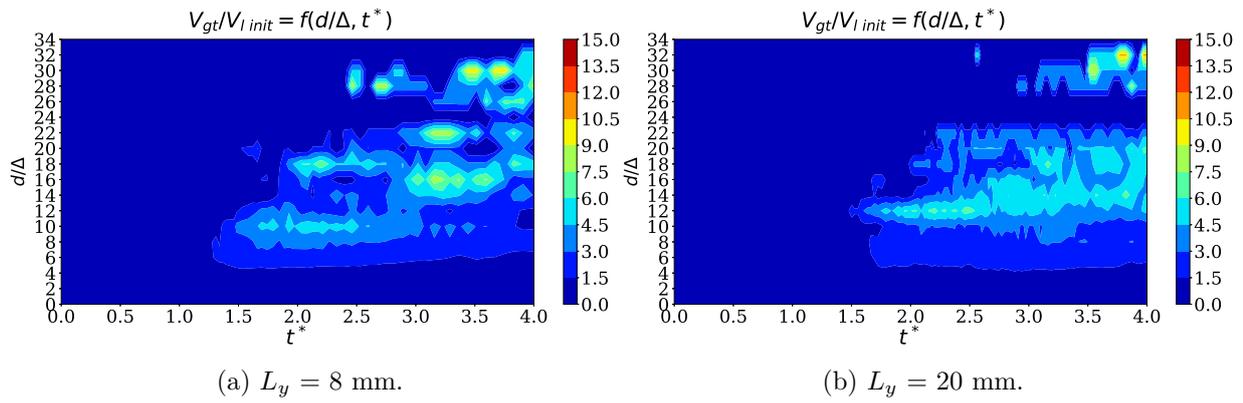


FIGURE A.13. – Distribution du volume de gouttes par taille, influence de la hauteur.

	t^*_{cmp}		t^*_{fin}	
L_y (mm)	8	20	8	20
d_{10} (μm)	240.6	203.1	306.3	237.5
d_{10}/Δ	7.7	6.5	9.8	7.6

TABLE A.5. – Comparaison des diamètres moyens, influence de la hauteur.

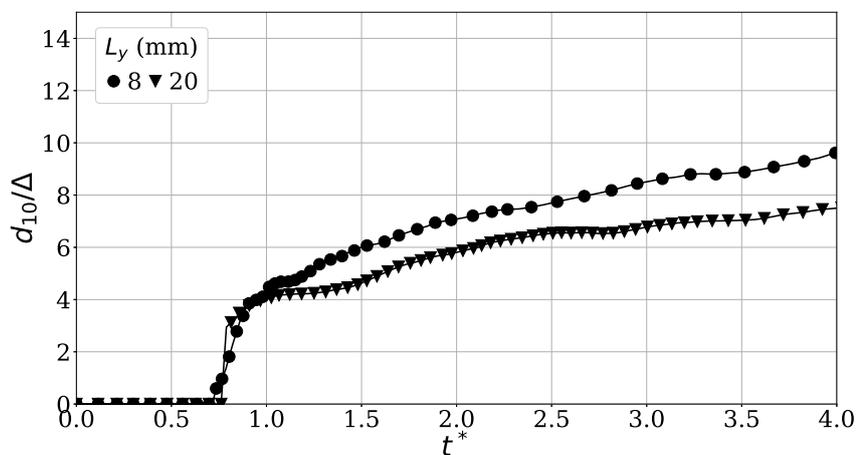


FIGURE A.14. – Diamètre moyen, influence de la hauteur.

A.4. Conservation des couples initiaux $MFR-We$

A.4.1. Indicateurs globaux

L'augmentation des nombres sans dimension initiaux éjecte plus rapidement les gouttes en hauteur, visibles par l'arrondissement progressif du début des enveloppes, Figure A.15. Toutefois, ces modifications influencent peu l'ouverture globale des sprays dont les valeurs sont résumées Table A.6. En effet, les premières gouttes sont toutes détectées proches de $t^* = 0.75$ alors que celles atteignant les extrémités verticales sont visibles aux alentours de $t^* = 2.0$. Ces faibles variations confirment la première observation visuelle de similitude entre les simulations et d'indépendance du développement des grandes échelles à cette formulation de t^* .

$MFR-We$	0.75-11.52	1.08-16.82	1.47-23.12
θ_{spray} (°)	35	40	33

TABLE A.6. – Angles d'ouvertures de spray, variations des couples $MFR-We$.

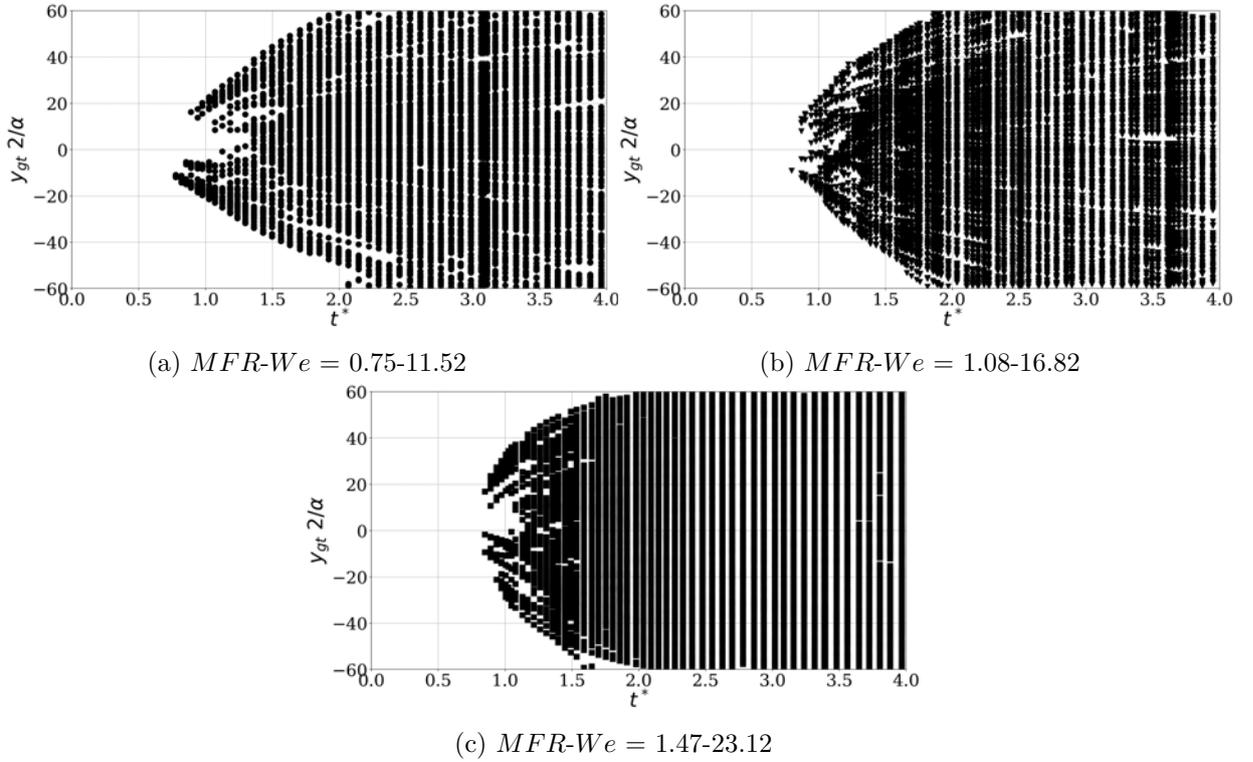


FIGURE A.15. – Positions verticales des gouttes, variations des couples $MFR-We$.

Les différences énergétiques de l'écoulement gazeux se manifestent au-travers du nombre de structures générées et plus particulièrement le nombre de gouttes, n_{gt} , Figure A.16. Cet indicateur démontre que les processus d'atomisation sont similaires avec des taux de production de nombres de gouttes équivalents, jusqu'à $t^* = 1.6$. Au delà, le surplus énergétique amplifie la quantité ainsi que le nombre maximal de gouttes produites.

A.4.2. Indicateurs locaux

Les distributions du nombre de gouttes sont similaires, bien que la sur-concentration des gouttes dans les petites classes de diamètres se renforce en fonction des nombres $MFR-We$. Les maximums se concentrent dans les plus petites classes, $d/\Delta \approx 2$, ce qui illustre des sprays composés d'une multitude de petites gouttes. Par ailleurs, ce nombre décroît au fur et à mesure que la taille des classes grandit, Figure A.17

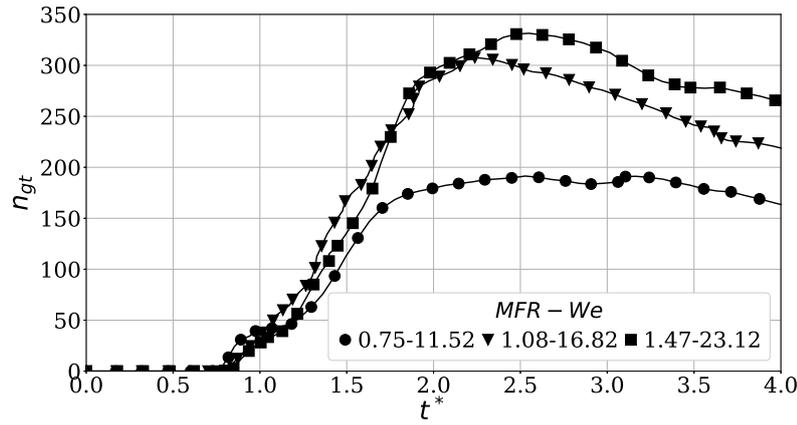


FIGURE A.16. – Nombre total de gouttes, variations des couples $MFR-We$.

Ces maximums atteints ne sont pas équivalents entre les simulations et grandissent en fonction des nombres sans dimension initiaux $MFR-We$. Ce comportement démontre que l'apport initial d'énergie favorise la création de gouttes de petit diamètre, Figure A.17d.

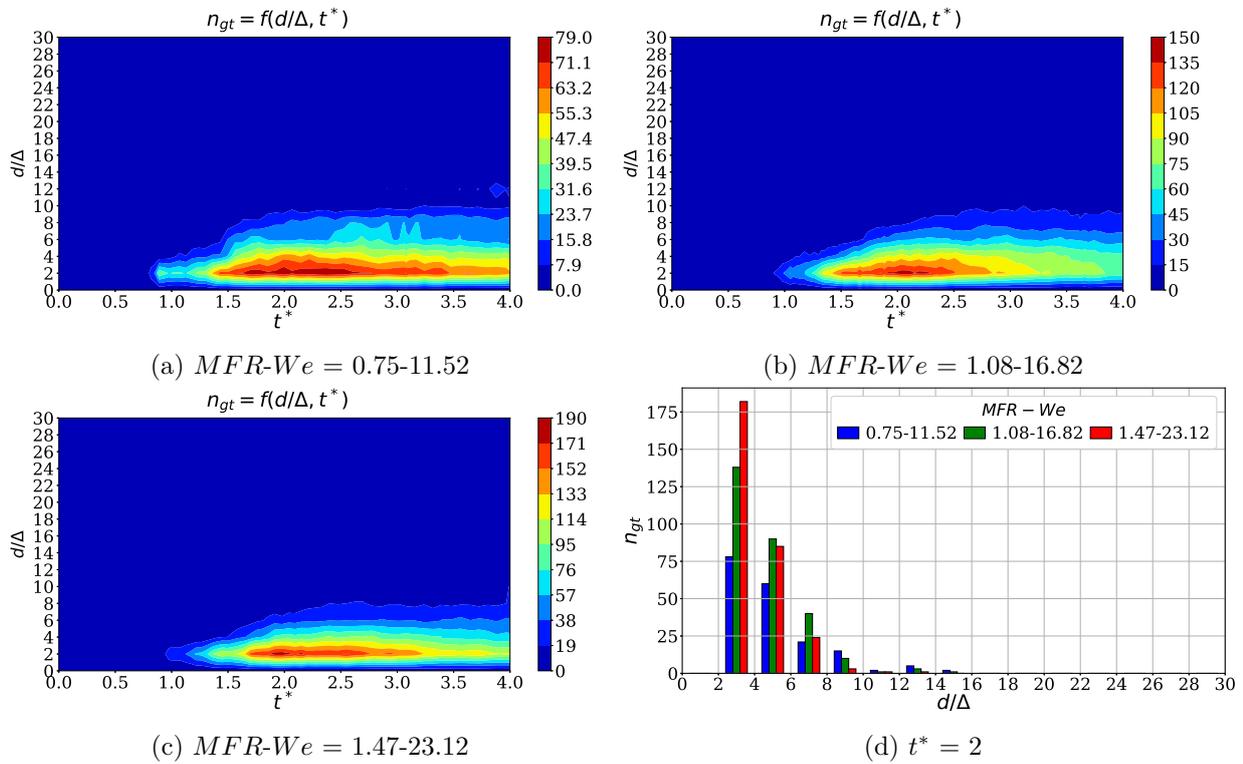


FIGURE A.17. – Distributions du nombre de gouttes par taille, variations des couples $MFR-We$.

Dès le début du processus d'atomisation le volume de gouttes se concentre dans deux zones distinctes, $d/\Delta = 5$ et $d/\Delta = 12$, Figure A.18a. Toutefois, la séparation entre ces zones s'estompe au fur et à mesure que le couple $MFR-We$ augmente, Figures A.18b et A.18c. Cela signifie que l'augmentation de l'énergie initiale a tendance à concentrer le volume des gouttes autour de la classe de diamètre $d/\Delta = 10$, Figure A.18d.

De plus, les larges gouttes détectées dans la première simulation ($MFR-We = 0.75-11.52$) telles que $d/\Delta > 20$ pour $t^* > 3.0$ disparaissent dans les deux autres configurations plus énergétiques. Ceci démontre qu'une meilleure pulvérisation du liquide retarde la création de ces larges gouttes, induites par les conditions limites.

La répartition verticale du volume des gouttes illustre une distribution plus homogène des gouttes lorsque le couple $MFR-We$ augmente, Figure A.19. En effet, les maximums locaux de

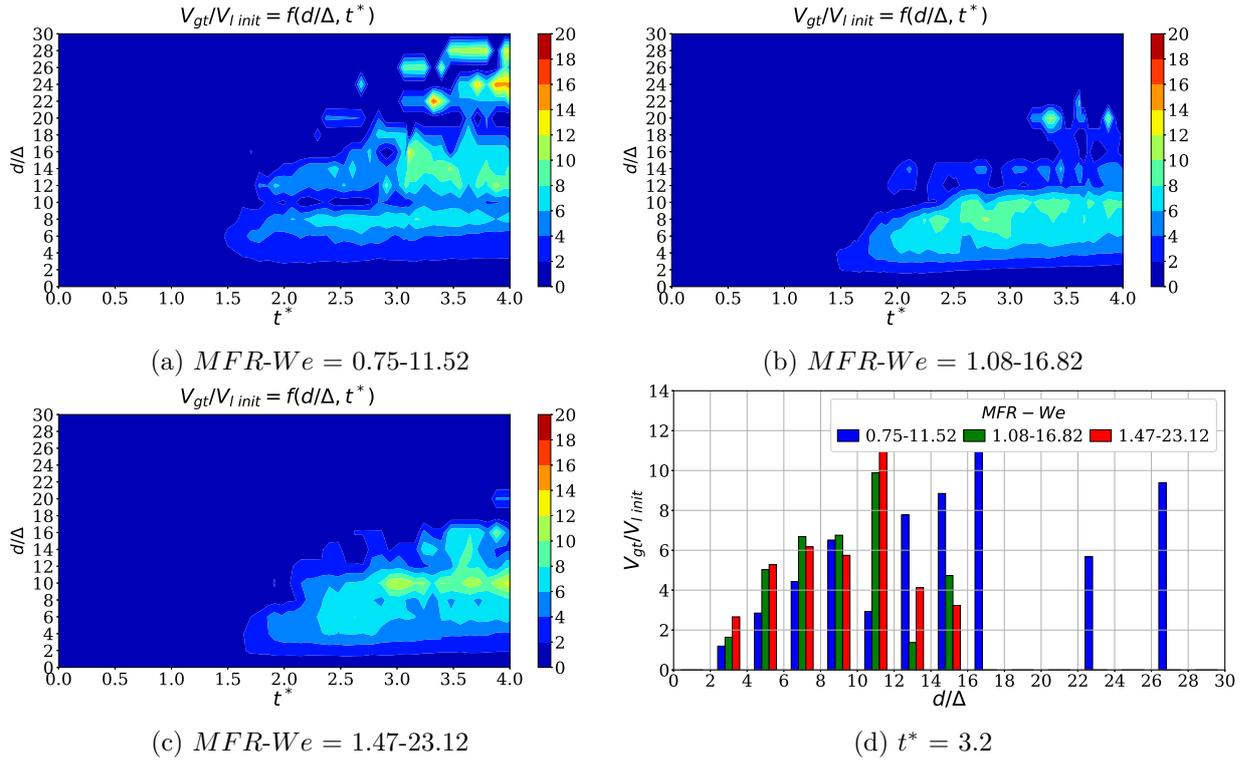


FIGURE A.18. – Distributions du volume de gouttes par taille, variations des couples $MFR-We$.

volume de gouttes diminuent au profit d'une diffusion verticale élargie, Figure A.19d.

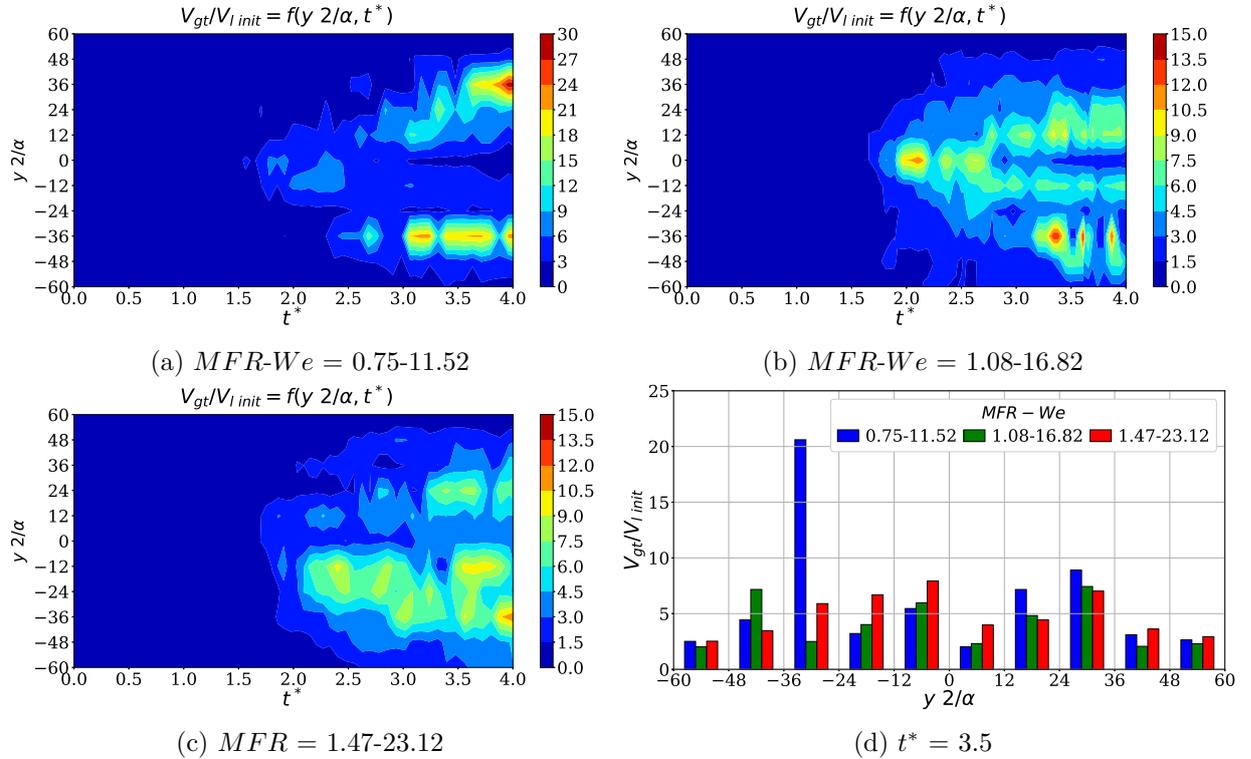


FIGURE A.19. – Distributions du volume de gouttes par hauteur, variations des couples $MFR-We$.

Le maximum par tranche verticale s'abaisse de 30 % pour la configuration $MFR-We = 0.75-11.52$ Figure A.19a, à moins de 15 % pour les deux autres, Figures A.19b et A.19c.

A.5. Effet du rapport des flux de quantités de mouvements, MFR

A.5.1. Indicateurs globaux

L'augmentation du rapport des flux de quantités de mouvements éjecte plus rapidement, dans la direction verticale, les gouttes générées lors des ruptures de membranes, Figures A.20a A.20b et A.20c. Ce phénomène se traduit par l'arrondissement des enveloppes lors de la détection des premières gouttes et un angle de spray qui s'ouvre, Table A.7.

MFR	0.75	1.08	1.47
θ_{spray} (°)	27	30	35

TABLE A.7. – Angles d'ouvertures de spray, effet du MFR .

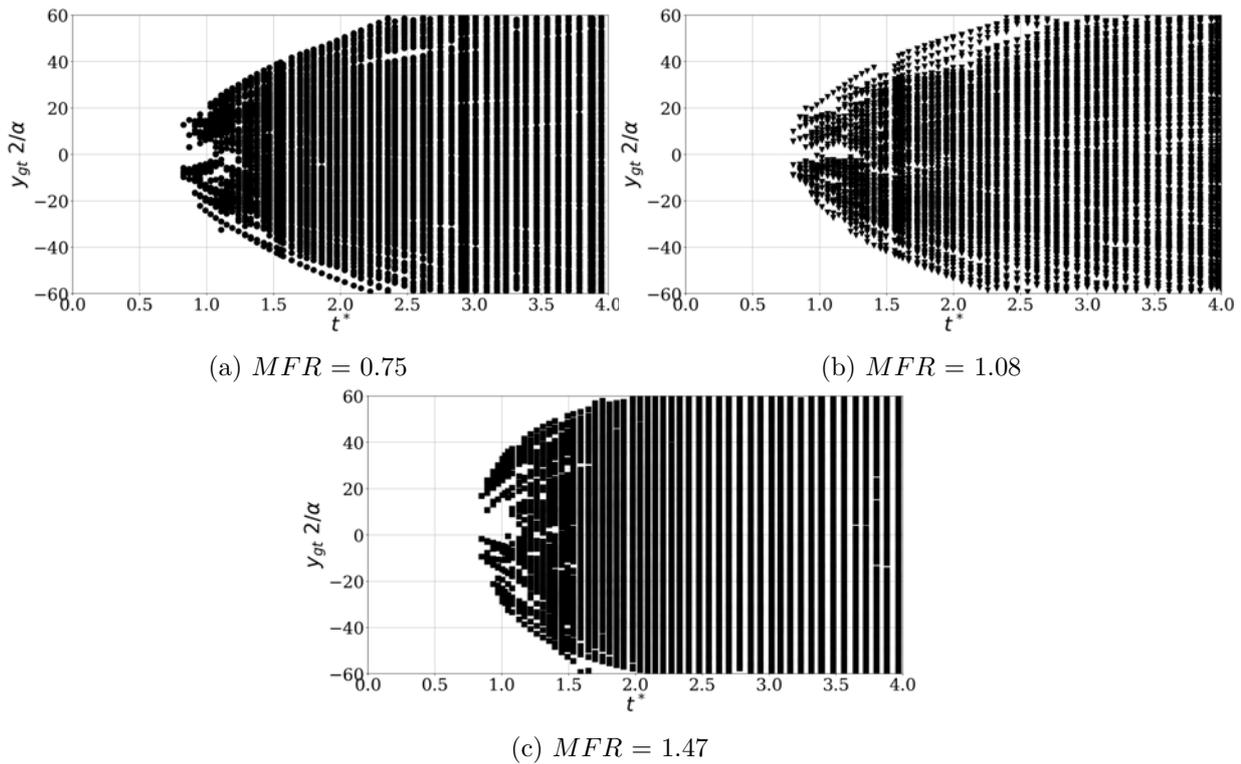


FIGURE A.20. – Positions verticales des gouttes, effet du MFR .

Le nombre de gouttes détectées illustre des processus de générations de gouttes très proches dans chacune des simulations, Figure A.21. Les taux de production du nombre de gouttes, les maximums atteints ainsi que les taux de destruction sont analogues.

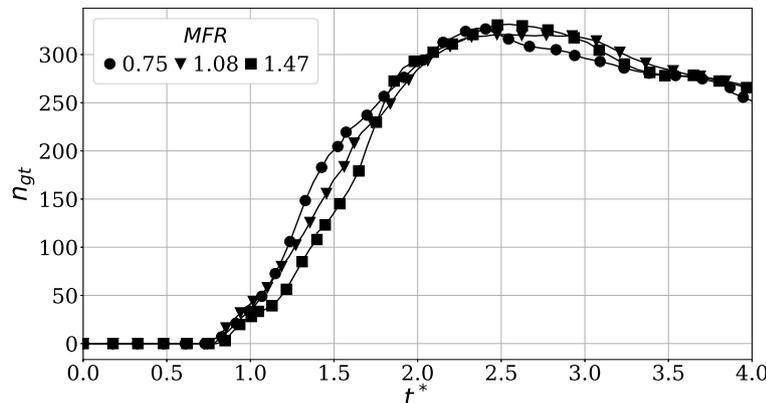


FIGURE A.21. – Nombre total de gouttes, effet du MFR .

A.5.2. Indicateurs locaux

La distribution du nombre de gouttes par classe de diamètre démontre l'indépendance du rapport des flux de quantités de mouvements sur la production des gouttes, Figure A.22. Non seulement les maximums de gouttes par classe sont identiques, mais leurs distributions ne présentent pas de différences significatives, Figure A.22d.

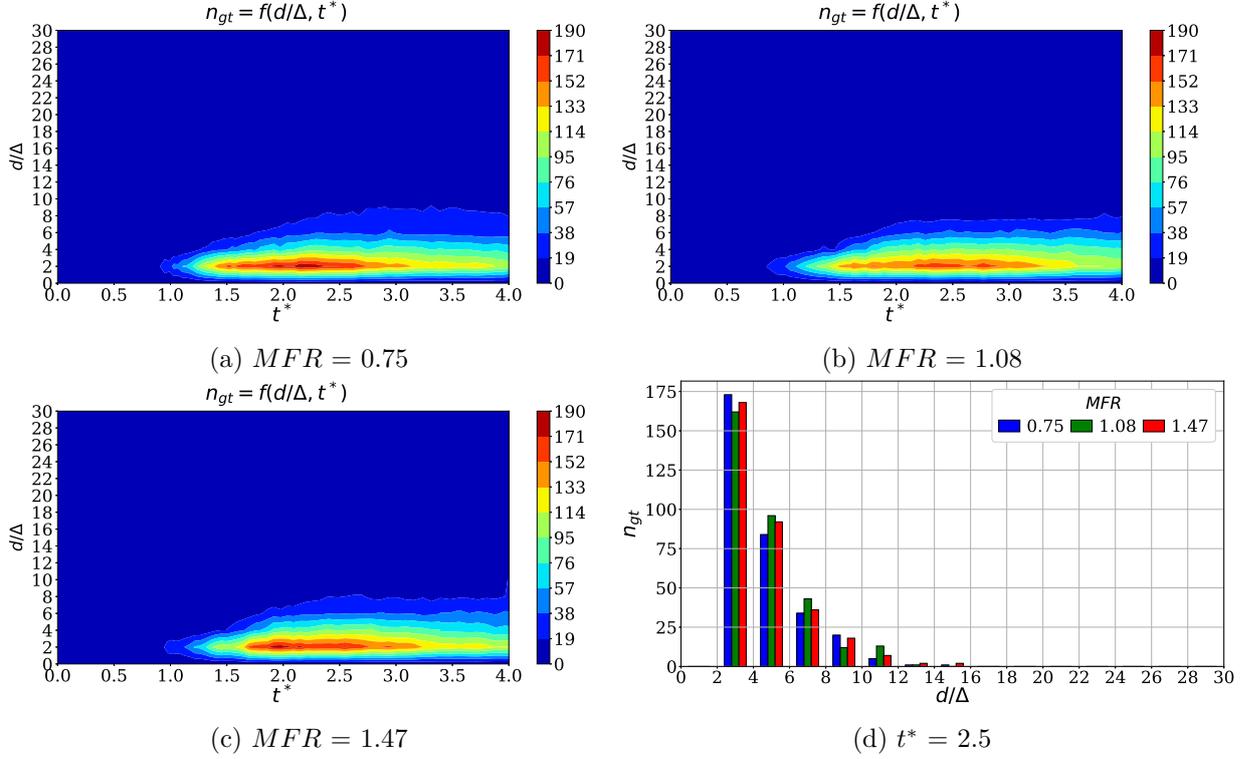
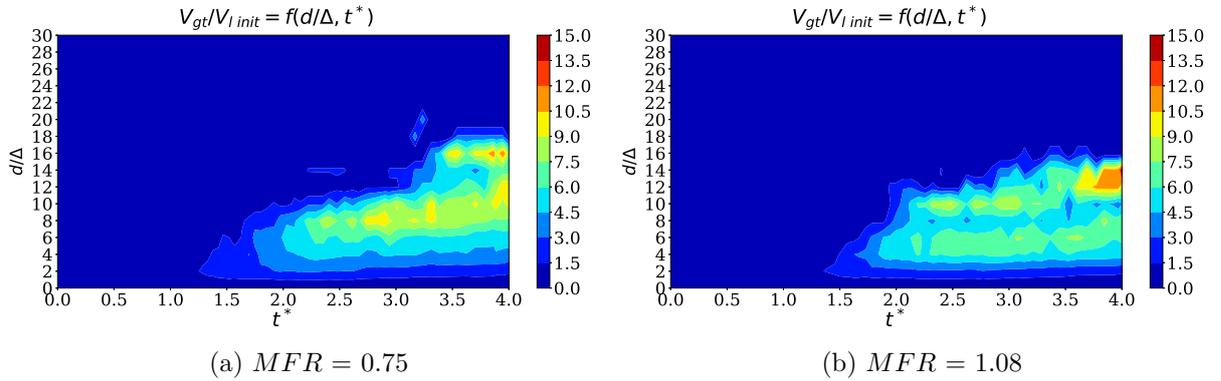


FIGURE A.22. – Distribution du nombre de gouttes par taille, effet du MFR .

Ce comportement analogue se poursuit via le volume de gouttes, Figure A.23. Quelques variations dans ces distributions sont visibles mais ne représentent que quelques pourcentages de volume de gouttes, Figures A.23a A.23b A.23c et A.23d. Par ailleurs, aucune goutte n'est détectée dans les classes de diamètres supérieures, $d/\Delta \geq 22$, grâce à la valeur élevée du Weber initial.



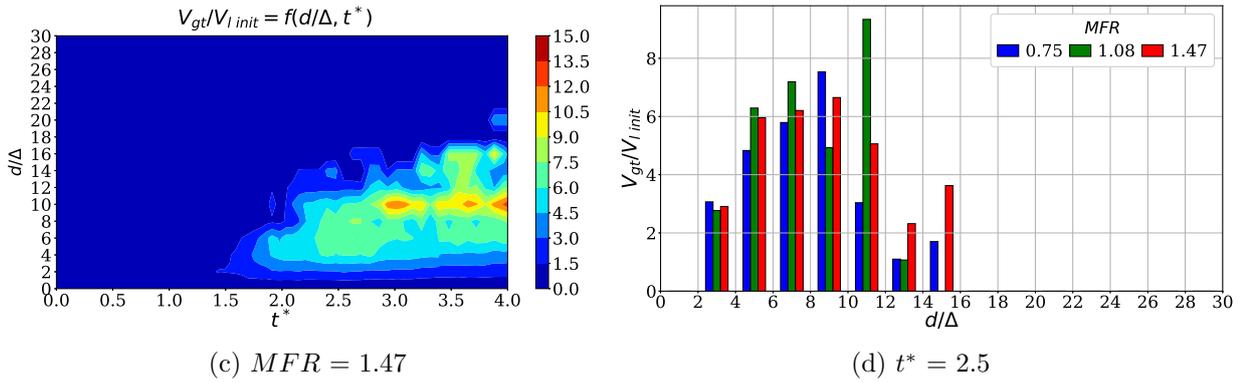


FIGURE A.23. – Distribution du volume de gouttes par taille, effet du MFR .

La distribution verticale du volume de gouttes s'appuie l'observation d'un meilleur étalement vertical du liquide lorsque le MFR augmente, Figure A.24.

Les maximums locaux sont abaissés et la diffusion verticale du liquide est meilleure pour des MFR croissants, Figures A.24a A.24b et A.24c. Un tel exemple est visible à $t^* = 2.5$, Figure A.24d.

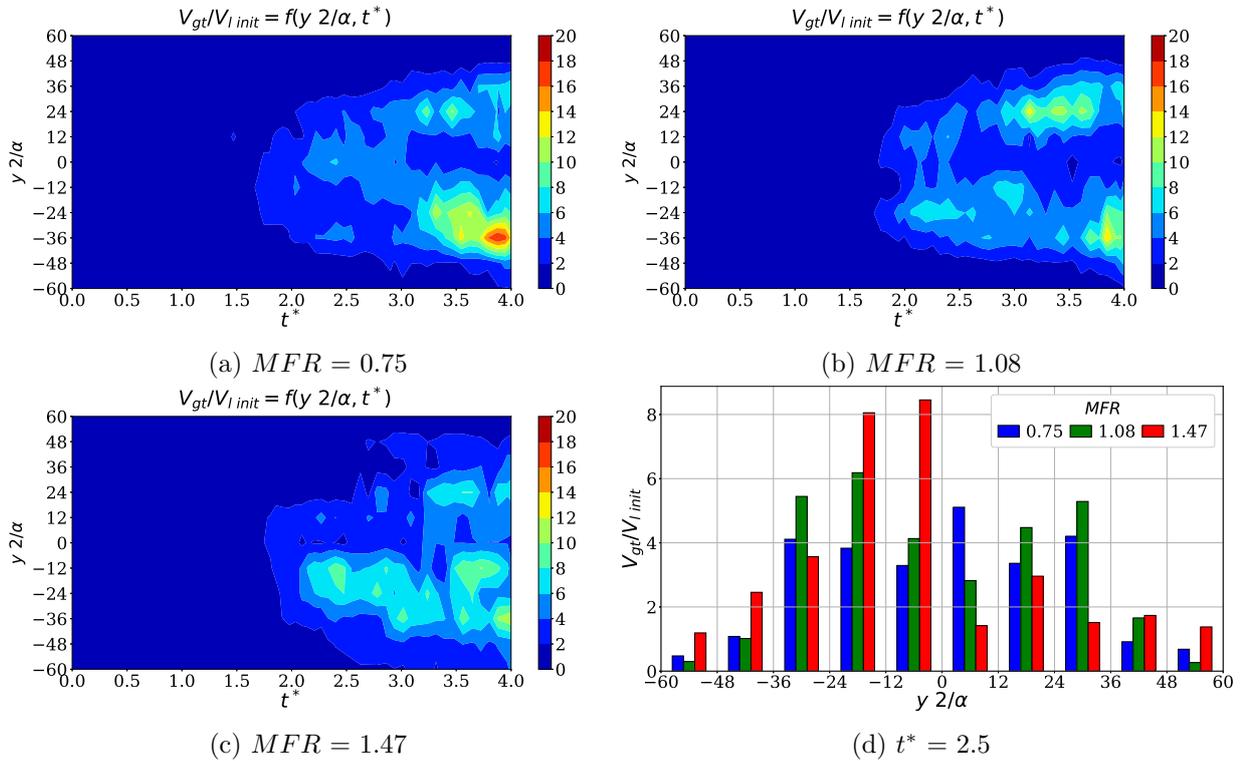


FIGURE A.24. – Distribution du volume de gouttes par hauteur, effet du MFR .

A.5.3. Diamètre caractéristique

L'augmentation du rapport des flux de quantités de mouvements influence peu la magnitude des phénomènes présents dans cette configuration simplifiée et pour ce processus d'atomisation.

Le diamètre moyen démontre par ses évolutions confondues que les propriétés du spray sont conservées pour toutes les simulations, Figure A.25. Ceci est la conséquence directe des distributions quasi identiques du nombre de gouttes Figure A.22. Plusieurs relevés de ce diamètre ont été effectués, notamment pour $t^*_{cmp} = 2.5$ et t^*_{fin} , Table A.8.

	t^*_{cmp}			t^*_{fin}		
MFR	0.75	1.08	1.47	0.75	1.08	1.47
d_{10} (μm)	210.6	210.6	210.6	257.4	257.4	257.4
d_{10}/Δ	4.5	4.5	4.5	5.5	5.5	5.5

TABLE A.8. – Comparaison des diamètres moyens, effet du MFR .

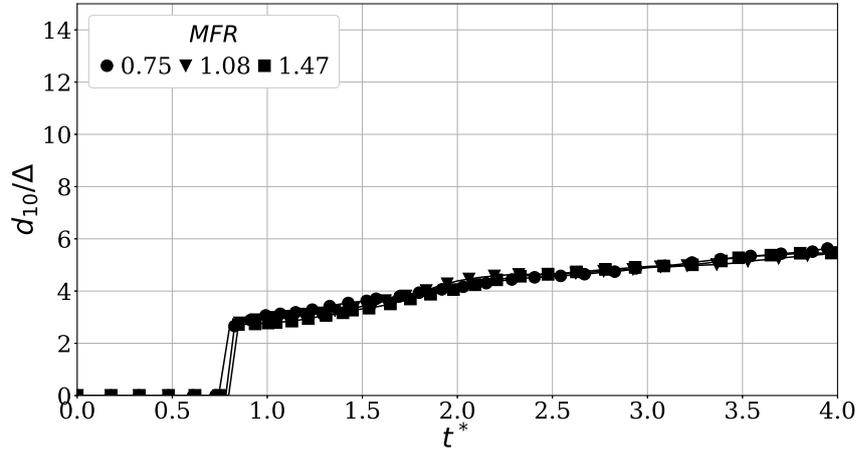


FIGURE A.25. – Diamètre moyen, effet du MFR .

A.6. Influence du Weber, We

A.6.1. Indicateurs globaux

Les ouvertures de spray ainsi que les angles de spray associés augmentent avec le nombre de Weber, Table A.9 et Figure A.26.

We	11.52	16.82	23.12
θ_{spray} ($^\circ$)	27	29	35

TABLE A.9. – Angles d'ouvertures de spray, étude du We .

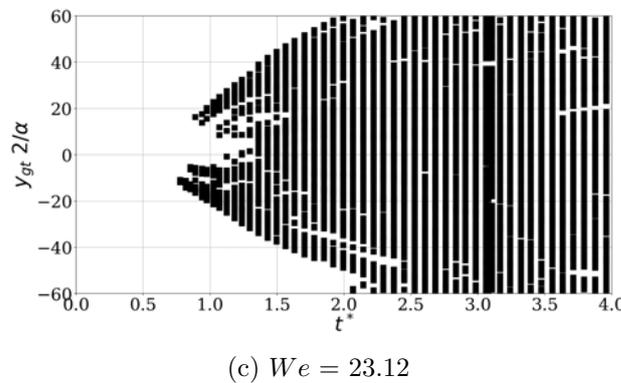
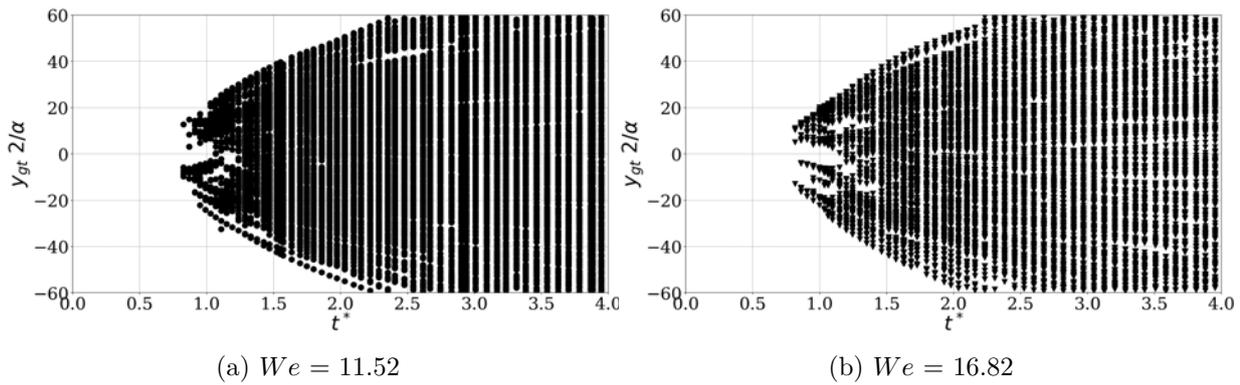


FIGURE A.26. – Positions verticales des gouttes, étude du We .

A.6.2. Indicateurs locaux

La distribution du nombre de gouttes par classe de diamètres est largement influencée par les variations du Weber. Les maximums se situent dans la plus petite des catégories, $2 < d/\Delta < 4$, avec au-delà, un nombre de gouttes détectées décroissant lorsque les classes s'agrandissent, Figure A.27d. Les variations de Weber amplifient la création des plus petites gouttes en s'arrêtant au-delà de $d/\Delta = 6$, Figures A.27a A.27b A.27c et A.27d.

Les variations de Weber influencent tout autant la distribution du volume de gouttes par classe de diamètre, Figure A.28.

L'élévation de ce nombre sans dimension fait chuter, jusqu'à la disparition totale, le volume de gouttes détectées des classes supérieures, $d/\Delta \geq 16$. Ce manque de volume est compensé par une sur-concentration centrée autour d'une autre classe, $d/\Delta = 10$. Autrement dit, l'élévation de Weber favorise la création de petites et moyennes gouttes tout en retardant la conversion des larges structures en gouttes.

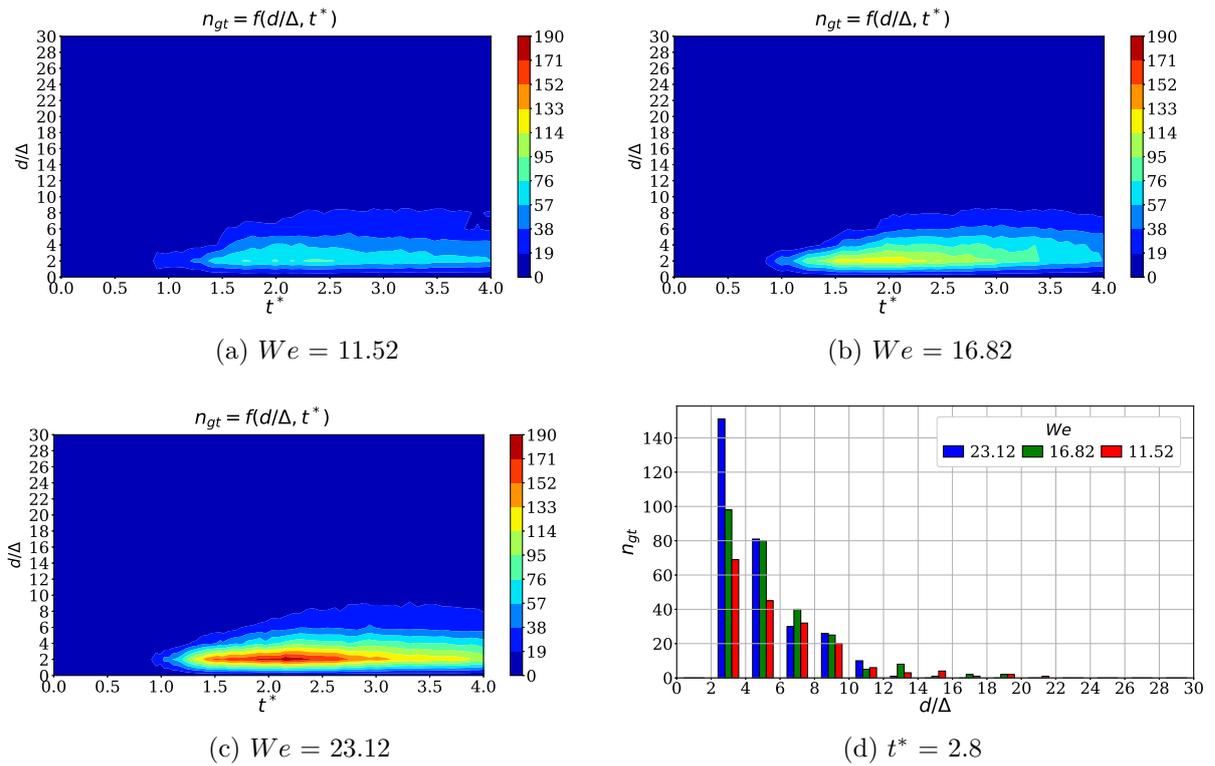


FIGURE A.27. – Distribution du nombre de gouttes par taille, étude du We .

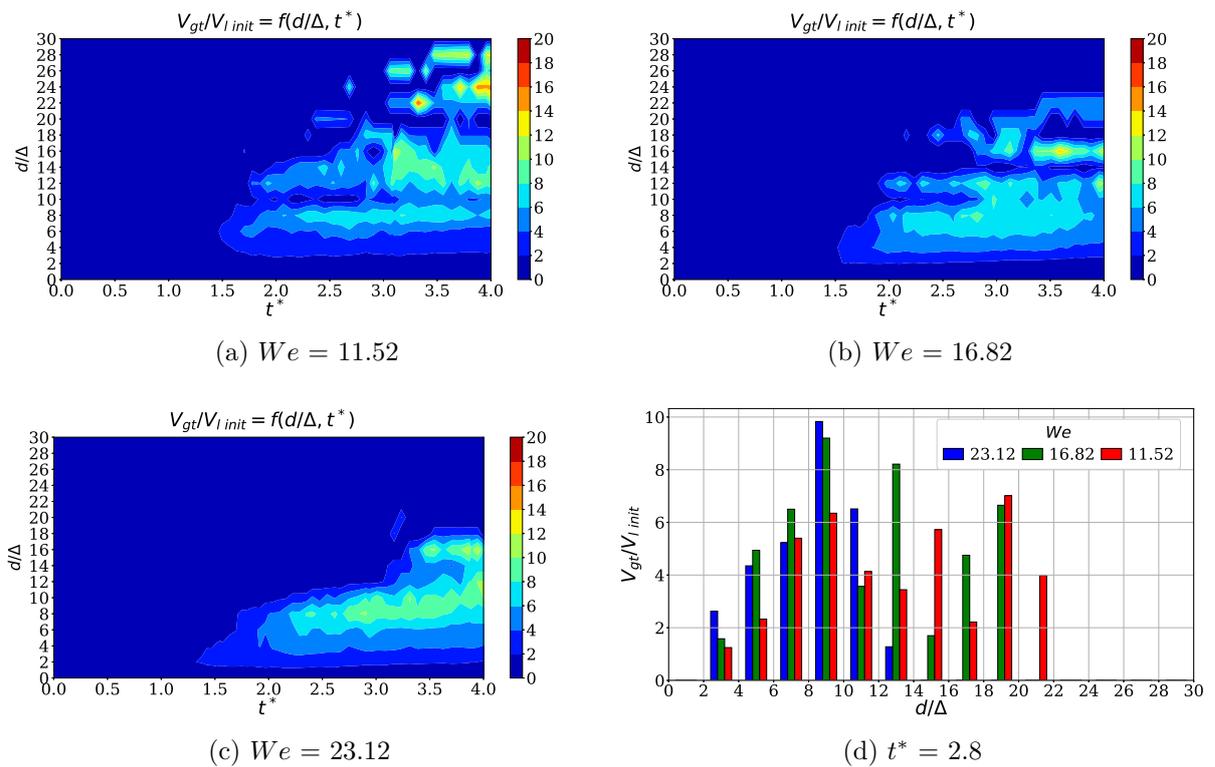


FIGURE A.28. – Distribution du volume de gouttes par taille, étude du We .

Le Weber agit sur la génération et la conversion des larges structures en gouttes. Ce phénomène est visible au-travers de la répartition verticale du volume de gouttes, Figure A.29.

Les volumineuses structures liquides générées par la nappe initiale sont converties en gouttes plus tôt lorsque le nombre de Weber diminue. Ces dernières, stabilisées en gouttes, sont visibles au-travers de l'important volume de gouttes détectées aux abords des extrémités verticales du

domaine, Figures A.29a A.29b et A.29c.

De plus, l'augmentation du Weber fait chuter le maximum détecté et retarde son apparition. Ceci provient d'une meilleure pulvérisation du liquide en petites gouttes ainsi que d'un temps de conversion en gouttes, rallongé lorsque ce nombre s'élève, Figure A.29d.

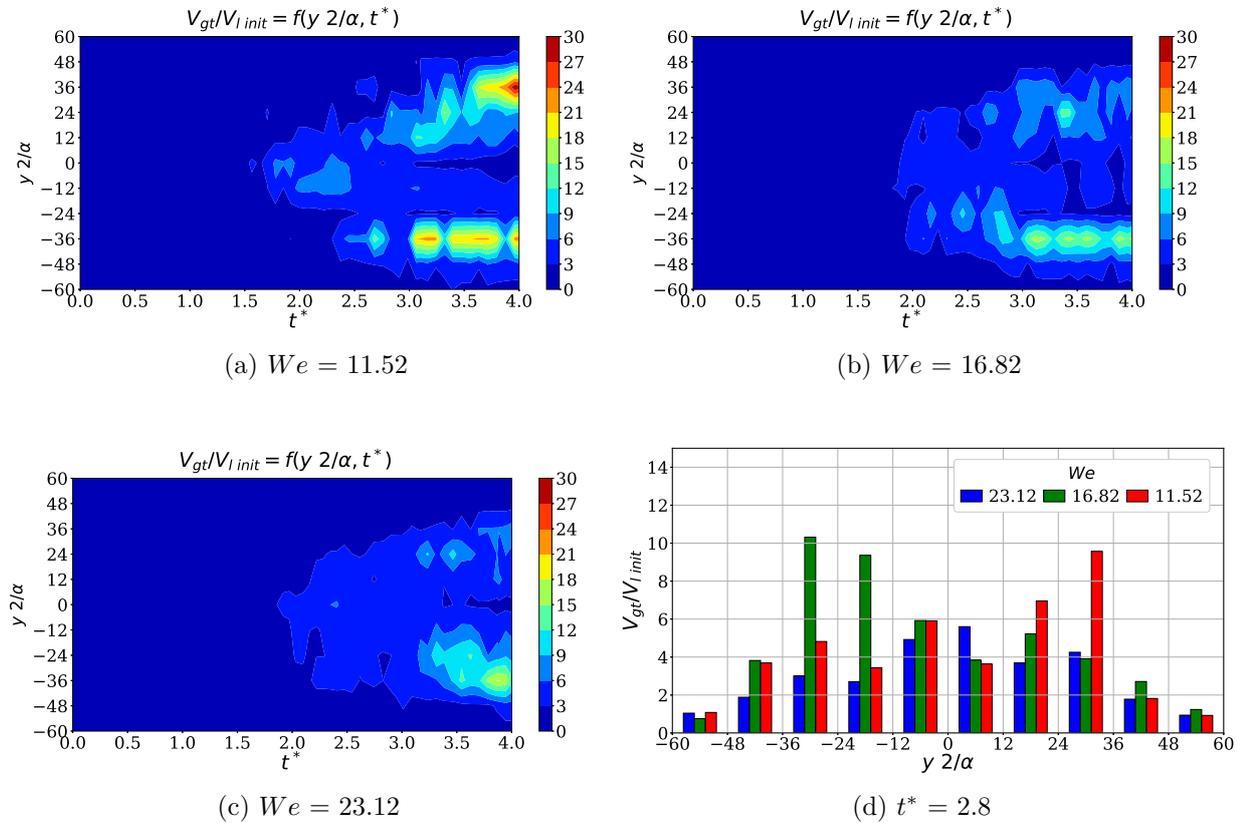


FIGURE A.29. – Distribution du volume de gouttes par hauteur, étude du We .

A.6.3. Diamètres caractéristiques

Le comportement du diamètre moyen décomposable en deux parties, Figure A.30. La première s'étend jusqu'à $t^* = 1.5$ avec des valeurs et des évolutions confondues, quel que soit le Weber initial. Cet instant se situe dans la phase caractéristique du développement des grandes échelles et démontre que les quelques gouttes générées jusqu'ici ont un diamètre moyen équivalent. Bien qu'étant très différente en nombre, la présence majoritaire des plus petites gouttes fait confondre toute évolution du diamètre moyen en une seule.

La seconde partie débute dès que $t^* > 1.5$. Des écarts entre les courbes se distinguent et se conservent jusqu'à l'arrêt des simulations. Les taux d'atomisation correspondant au début de cette partie sont de l'ordre de 8 %. Ceci signifie que les processus d'atomisation, en créant un volume de gouttes significatif, se différencient par le nombre de plus grosses gouttes générées.

En effet, un Weber plus faible permet la génération de gouttes plus grosses tout en restreignant la création des plus petites. Des mesures de ces écarts sont visibles au-travers des relevés de diamètre moyen résumés Table A.10, avec t^*_{cmp} conservé à 2.5.

	t^*_{cmp}			t^*_{fin}		
We	11.52	16.82	23.12	11.52	16.82	23.12
d_{10} (μm)	257.4	234	210.6	292.5	238.1	257.4
d_{10}/Δ	5.5	5.0	4.5	6.25	6.05	5.5

TABLE A.10. – Comparaison des diamètres moyens, étude du We .

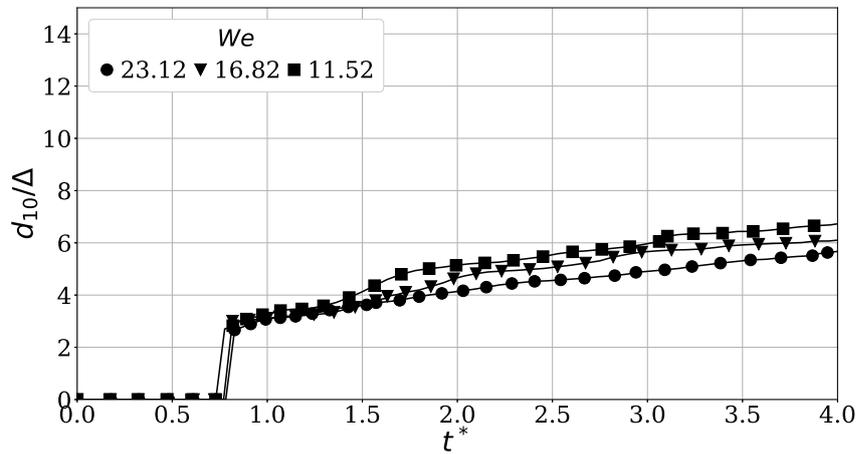


FIGURE A.30. – Diamètre moyen, étude du We .

A.7. Modification du rapport des densités, $\hat{\rho}$

L'objectif de cette étude est d'analyser l'influence du rapport des densités sur le processus d'atomisation en configuration périodique tout en conservant les nombres sans dimension restant à leurs valeurs de référence.

A.7.1. Nombres sans dimension et conditions initiales

Afin d'illustrer l'influence du rapport de densité sur le processus d'atomisation, indépendamment des autres nombres sans dimension, trois valeurs ont été analysées. De plus, les nombres sans dimension restants ont été repris du cas de référence, Table 8.3. Les conditions initiales qui découlent des nombres sans dimension Table A.11 sont renseignées Table A.12 et obtenues par la méthodologie de similitude, section 6.4.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
$6 \cdot 10^{-3}$		1118.0			
$12 \cdot 10^{-3}$	598.8	1581.1	11.52	$1.796 \cdot 10^{-2}$	0.75
$24 \cdot 10^{-3}$		2236.1			

TABLE A.11. – Nombres sans dimension utilisés, variations de $\hat{\rho}$.

ρ_g	U_g	μ_g	ρ_l	U_l	μ_l	σ
6	22.3					$6.4 \cdot 10^{-2}$
12	15.8	$1.8 \cdot 10^{-5}$	10^3	2	10^{-3}	$5.9 \cdot 10^{-2}$
24	11.2					$5.2 \cdot 10^{-2}$
kg/m ³	m/s	Pa s	kg/m ³	m/s	Pa s	N/m

TABLE A.12. – Conditions initiales utilisées, variations de $\hat{\rho}$.

A.7.2. Observations des processus d'atomisations

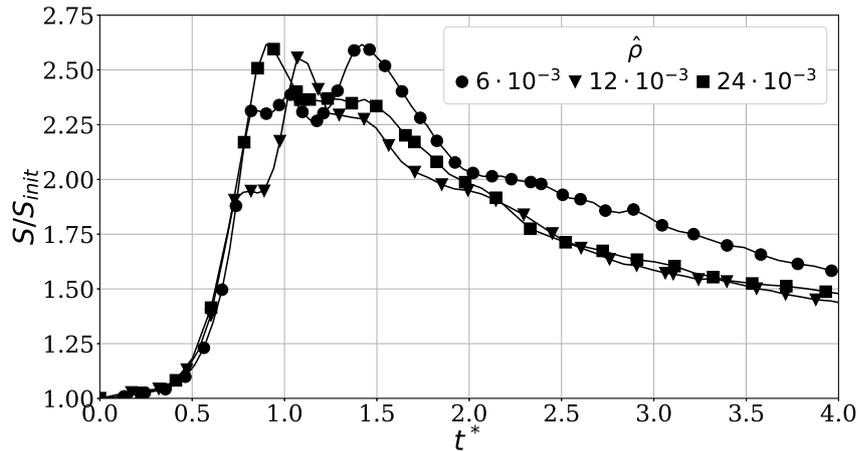
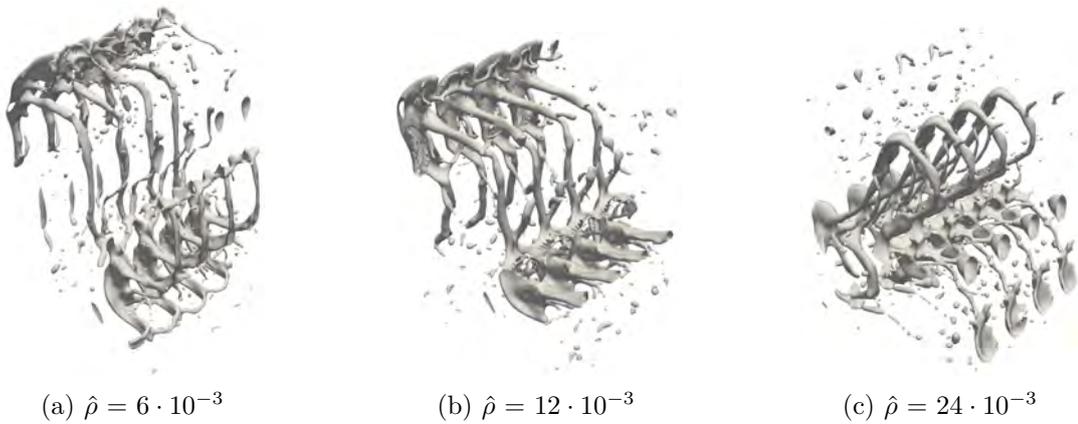
Le développement des grandes échelles est analogue quelles que soient les valeurs de rapport des densités. Les évolutions de surface proche de $t^* \leq 1.1$ diffèrent avec des valeurs maximales atteintes plus tardivement lorsque le rapport des densités diminue. Enfin, un écart de surface est visible lors de la phase de stabilisation du spray entre la première simulation ($\hat{\rho} = 6 \cdot 10^{-3}$) et les deux restantes. Ce dernier illustre une première différence comportementale attendue dans cette zone entre ces simulations.

Au sein de la phase associée à la production maximale de surface, $t^* \leq 1.1$, les allures de l'interface confirment la conservation d'une fragmentation liquide ligamentaire, Figure A.32.

Toutefois, le déplacement vertical des structures liquides est différent selon les simulations. Les concentrations de liquide proche de l'origine augmente avec le rapport des densités, alors qu'à l'inverse, leurs écartements, étalement vertical, s'agrandissent lorsque ce dernier chute.

En effet, les augmentations de densité impliquent un frein supplémentaire sur les mouvements du liquide et restreignent ainsi ses potentielles dispersions verticales. Cette contrainte se constate sur les plus volumineuses structures dont la topologie est la plus perturbée. A contrario, les futurs ligaments parviennent à s'élever, s'éloigner, verticalement de l'origine en pénétrant le gaz. Cela peut s'expliquer par des topologies plus profilées que dans le cas des structures volumineuses.

Ce changement de densité altère les processus d'atomisation en affectant les déplacements des structures liquides les plus volumineuses, Figure A.33.


FIGURE A.31. – Évolution de la surface liquide, variations de $\hat{\rho}$.

FIGURE A.32. – Interface à $t^* = 1.1$, variations de $\hat{\rho}$.

Pour les plus faibles rapports de densité, les plus volumineuses structures liquides s'élèvent rapidement, se positionnent aux abords des limites verticales du domaine géométrique et y restent, Figure A.33a. Cette stagnation provient de l'action combinée des conditions limites périodiques et de la séparation symétrique du liquide qui atténuent leurs déplacements verticaux dans cette zone. De plus, les ligaments qui relient ces structures s'étirent et se fragmentent sous l'effet de la tension de surface en générant de petites gouttes.

À l'inverse, lorsque le rapport de densité augmente, ces structures volumineuses restent cloisonnées autour de l'origine, Figure A.33c. Les déplacements initiaux, induits par la perturbation de la vitesse initiale, sont atténués par l'augmentation du rapport des densités. Toutefois, les ligaments liquides réussissent à pénétrer la phase gazeuse, grâce à leurs profils géométriques plus adaptés, et se rompent en générant des gouttes.

La phase de stabilisation du spray est modifiée par les variations de densité, Figure A.34.

Pour les plus faibles densités, les grands déplacements verticaux des structures volumineuses étirent fortement les ligaments liquides. Ces derniers génèrent en se rompant une multitude de petites gouttes dans un grand espace centré à l'origine, Figure A.34a. De plus, la majorité du liquide reste concentrée aux limites du domaine numérique en un ensemble de structures aux topologies quelconques. Ces dernières, du fait de leurs volumes importants, se stabiliseront plus tardivement grâce à la tension de surface du liquide.

À l'inverse, lorsque le rapport de densités s'élève, cet ensemble de structures liquides quelconques reste cloisonné et se positionne à l'origine. Les ligaments liquides qui se sont développés en périphérie se rompent en générant des gouttes au dessus et en dessous de cette zone. N'étant pas soumis aux mêmes contraintes d'étirement que dans le cas précédent, ces ligaments se rompent en gouttes de tailles supérieures, Figure A.34c.

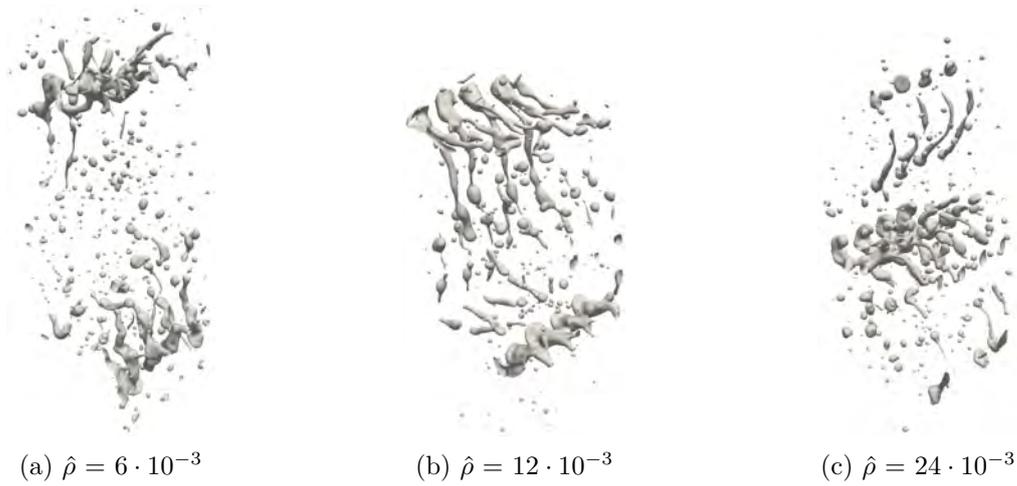


FIGURE A.33. – Interface à $t^* = 1.9$, variations de $\hat{\rho}$.

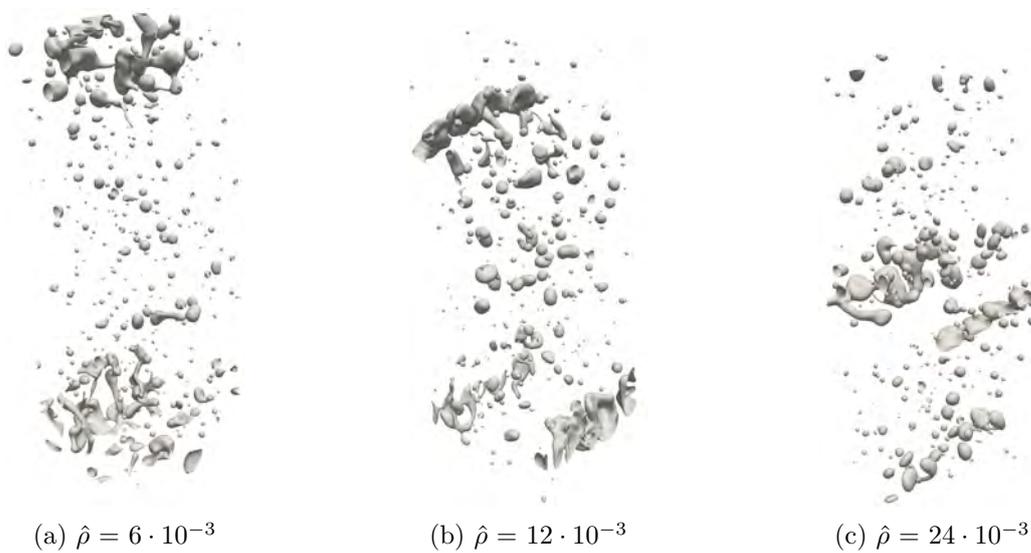


FIGURE A.34. – Interface à $t^* = 2.4$, variations de $\hat{\rho}$.

A.7.3. Indicateurs globaux

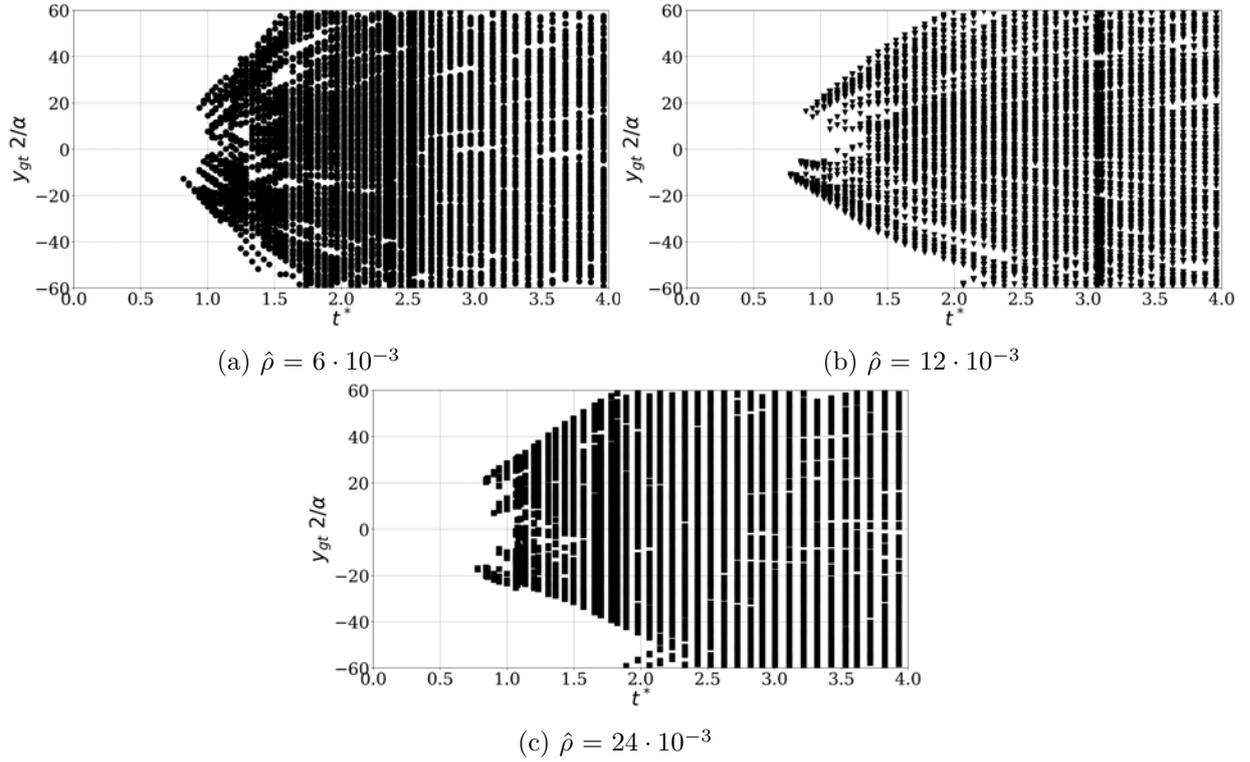
Bien que les contributions de surface des grandes échelles soient analogues, d'un point de vue intégral, Figure A.31, leurs topologies ne coïncident pas, Figure A.32. Cette différence comportementale se retrouve dans l'ouverture de spray équivalent, Table A.13, qui est mesurée à partir de l'enveloppe globale de la position des gouttes, Figure A.35.

L'importante ouverture, dans le cas de la faible densité du gaz, provient du déplacement rapide des larges structures, Figure A.35a. A contrario, la plus forte densité ne voit pas son angle se réduire puisque les ligaments liquides se déploient en périphérie de la zone confinée du liquide, Figure A.35c.

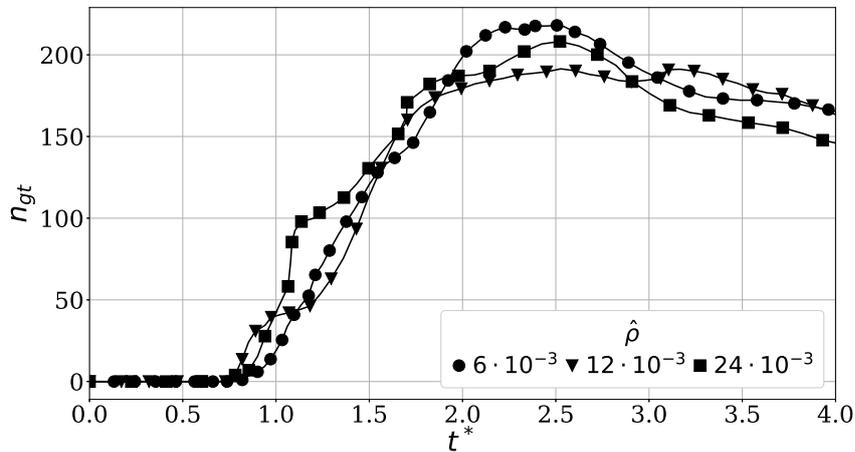
$\hat{\rho}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$12 \cdot 10^{-3}$	$24 \cdot 10^{-3}$
θ_{spray} (°)	50	35	33

TABLE A.13. – Angles d'ouvertures de spray, variations de $\hat{\rho}$.

Les évolutions du nombre de gouttes varient peu lorsque le rapport des densités change, Figure A.36. Bien que des fluctuations soient présentes, les taux de production du nombre de gouttes


FIGURE A.35. – Positions verticales des gouttes, variations de $\hat{\rho}$.

sont globalement analogues avec des valeurs maximales proches et localisées aux mêmes instants. Ces évolutions démontrent que les étapes générant ces gouttes sont globalement respectées et coïncident temporellement, à savoir, la rupture de membrane et la fragmentation des ligaments.


FIGURE A.36. – Nombre total de gouttes, variations de $\hat{\rho}$.

Les évolutions du volume de gouttes ainsi que les maximums atteints sont fortement impactés par les changements de $\hat{\rho}$, Figure A.37.

Ces différences démontrent que, bien qu'ayant un *MFR* identique, les variations de $\hat{\rho}$ influencent et peuvent pénaliser le processus d'atomisation en configuration périodique. En effet, la simulation produisant le meilleur taux d'atomisation est le cas intermédiaire pour lequel $\hat{\rho} = 12 \cdot 10^{-3}$.

De tels écarts peuvent s'expliquer par l'ajout de contraintes supplémentaires sur les déplacements verticaux du liquide. Le cloisonnement des larges structures liquides, proche de l'origine ou des limites verticales du domaine, retarde la fragmentation d'une grande partie du liquide ainsi que sa conversion en gouttes, Figures A.33a et A.33c.

Enfin, la surface totale des gouttes évolue identiquement au volume de gouttes précédemment

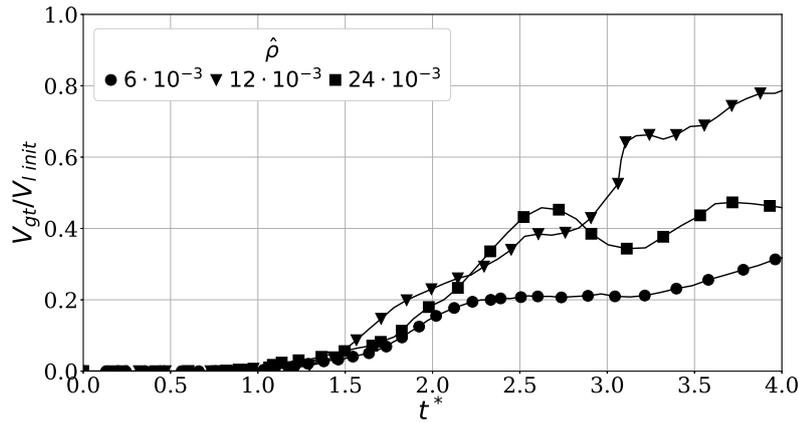


FIGURE A.37. – Volume total des gouttes, variations de $\hat{\rho}$.

mentionné ce qui complexifie son interprétation, Figure A.38. Le nombre de gouttes associé étant similaire dans toutes les simulations, la quantité de surface de goutte n'apporte pas d'informations complémentaires sur les sprays générés.

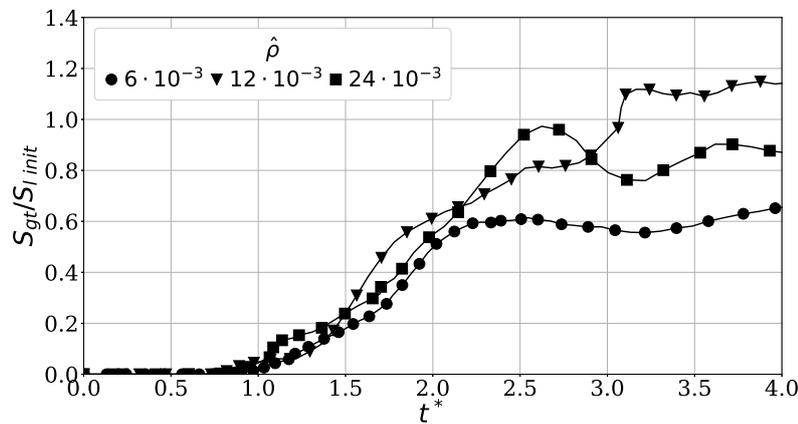
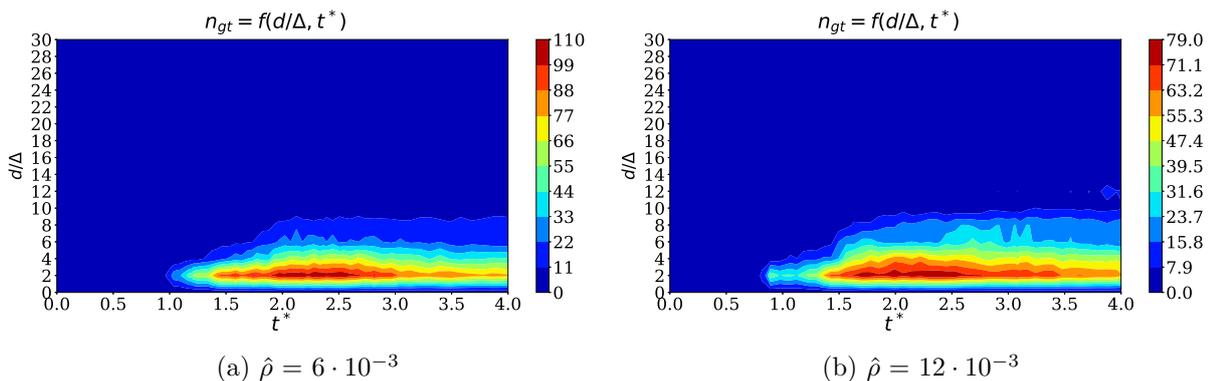
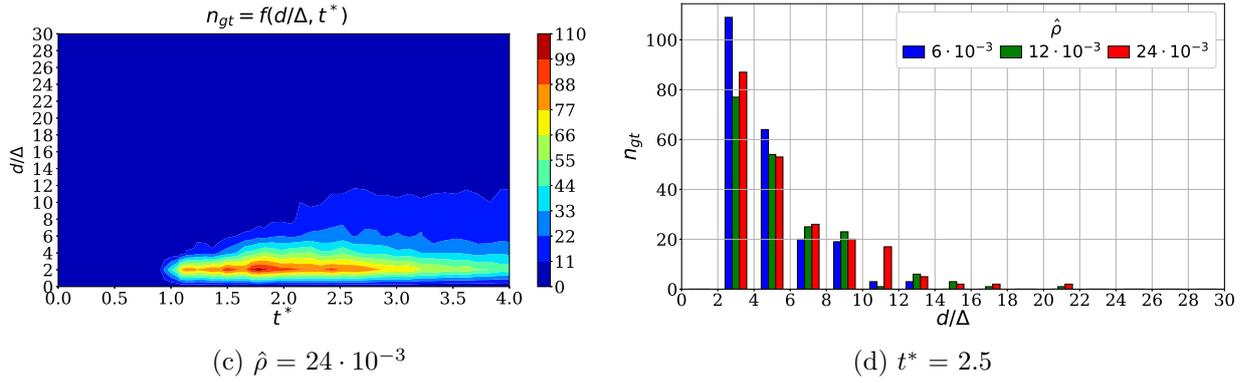


FIGURE A.38. – Surface totale des gouttes, variations de $\hat{\rho}$.

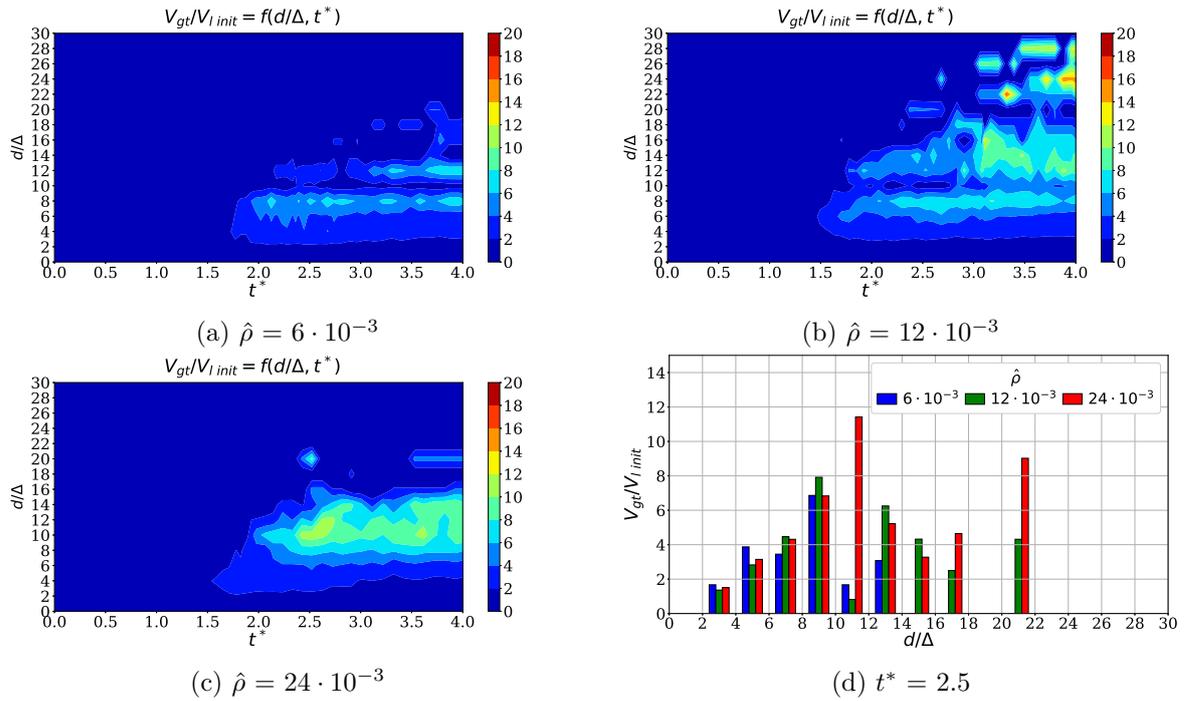
A.7.4. Indicateurs locaux

La distribution du nombre de gouttes par taille est globalement conservée quel que soit le rapport de densité employé, Figure A.39. Les maximums se situent toujours dans la plus petite des classes de diamètre et le nombre de gouttes détectées décroît lorsque ces classes s'agrandissent, Figure A.39d. De plus, quel que soit le rapport de densité initial, la valeur de ces maximums oscille autour d'une valeur proche de 100 gouttes détectées.




FIGURE A.39. – Distribution du nombre de gouttes par taille, variations de $\hat{\rho}$.

Bien que la distribution du volume des gouttes soit conservée pour $d/\Delta < 10$, des écarts significatifs sont visibles au-dessus de cette valeur, Figure A.40. Pour les deux premières simulations, ces différences s'expliquent par un étirement vertical des ligaments plus ou moins intense, Figures A.40a, A.40b et A.40d. À l'inverse, la dernière simulation rassemble la majorité du liquide convertit en gouttes, autour de $d/\Delta = 10$, Figures A.40c et A.40d. Ce comportement semble provenir d'un processus de fragmentation des ligaments dissocié des deux autres simulations, Figure A.32.


FIGURE A.40. – Distribution du volume des gouttes par taille, variations de $\hat{\rho}$.

Conformément aux visualisations de l'interface en fin de processus d'atomisation Figure A.33, la distribution verticale du liquide est impactée par les changements du rapport des densités, Figure A.41.

Les deux premières simulations sont caractérisées par une rupture ligamentaire qui repose sur un déplacement vertical des structures. Ainsi, le domaine dans lequel les gouttes sont générées puis réparties, n'est fonction que du déplacement du liquide, Figures A.41a et A.41b. Ce domaine disponible se réduit lorsque le rapport des densités augmente puisque les structures deviennent de plus en plus cloisonnées à l'origine.

Ce resserrement du liquide est visible via la dernière simulation, Figure A.41c, dans laquelle les ligaments se développent en périphérie du liquide, Figures A.32c et A.33c.

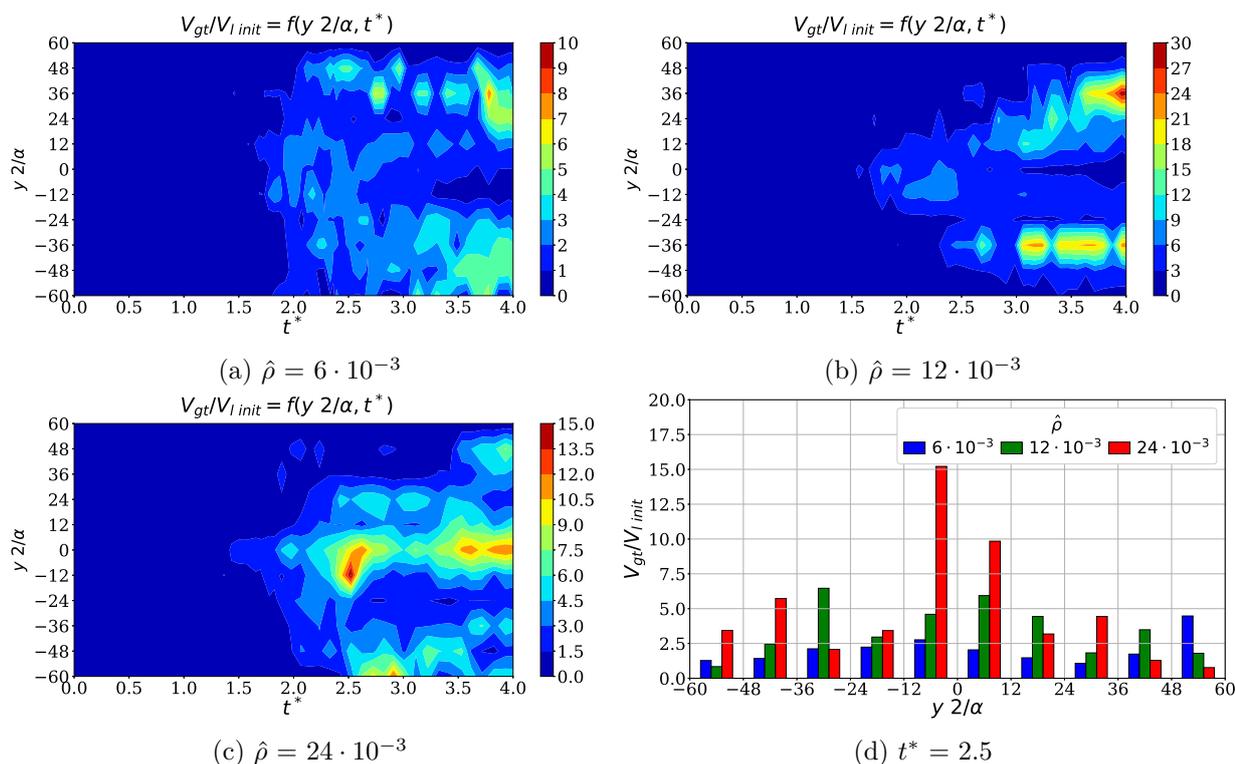


FIGURE A.41. – Distribution du volume des gouttes par hauteur, variations de $\hat{\rho}$.

A.7.5. Diamètres caractéristiques

Les faibles variations du diamètre moyen, Figure A.42, découlent de la conservation des distributions du nombre de gouttes par taille, Figure A.39. Des relevés de ce diamètre sont présentés Table A.14, avec un temps de comparaison conservé tel que $t^*_{cmp} = 2.5$.

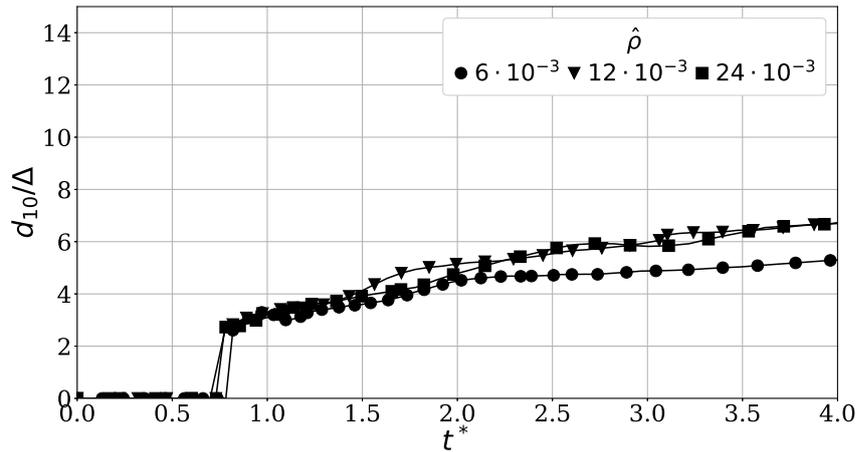
	t^*_{cmp}			t^*_{fin}		
	$6 \cdot 10^{-3}$	$12 \cdot 10^{-3}$	$24 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$12 \cdot 10^{-3}$	$24 \cdot 10^{-3}$
d_{10} (μm)	224.6	271.4	276.1	248	271.4	308.8
d_{10}/Δ	4.8	5.8	5.9	5.3	5.8	6.6

TABLE A.14. – Comparaison des diamètres moyens, variations de $\hat{\rho}$.

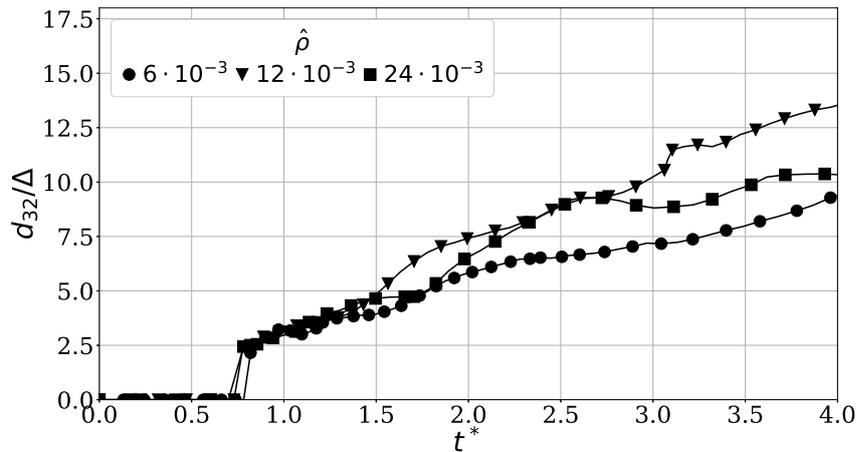
La plus faible des évolutions de d_{32} est associée à la simulation possédant le plus faible taux d'atomisation, $\hat{\rho} = 6 \cdot 10^{-3}$. Ce comportement traduit un manque de gouttes volumineuses puisque les nombres de gouttes sont proches, Figure A.36, quel que soit le rapport de densité initial.

A contrario, lorsque ce rapport s'accroît, le cloisonnement subi par le liquide s'amplifie et favorise les collisions entre structures ainsi que leurs conversions, à plus long terme, en gouttes. Ce phénomène se retrouve dans les deux dernières simulations, ($\hat{\rho} = 12 \cdot 10^{-3}$, $24 \cdot 10^{-3}$), à travers d'importantes fluctuations de volumes et de surfaces qui impactent le diamètre de Sauter à plusieurs reprises $t^* = (2.7, 3.1)$, Figures A.37 et A.38. Ces fortes variations reflètent une détection de gouttes variable qui est soumise aux collisions entre gouttes dans un espace réduit.

Des relevés de ce diamètre caractéristiques sont réalisés à plusieurs instants Table A.15.


FIGURE A.42. – Diamètre moyen, variations de $\hat{\rho}$.

	t^*_{cmp}			t^*_{fin}		
	$6 \cdot 10^{-3}$	$12 \cdot 10^{-3}$	$24 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$12 \cdot 10^{-3}$	$24 \cdot 10^{-3}$
d_{32} (μm)	304.2	421.2	421.2	439.9	636.5	477.3
d_{32}/Δ	6.5	9.0	9.0	9.4	13.6	10.2

TABLE A.15. – Relevés des diamètres de Sauter, variations de $\hat{\rho}$.

FIGURE A.43. – Diamètre de Sauter, variations de $\hat{\rho}$.

A.7.6. Conclusion

L'objectif de cette étude était d'analyser et d'illustrer l'influence du rapport des densités sur le processus d'atomisation en configuration périodique et indépendamment des autres nombres sans dimension.

Les changements induits par les variations du rapport des densités altèrent le déroulement de l'atomisation en configuration périodique. Ceci a été observé depuis la phase associée au développement des grandes échelles jusqu'à la génération et la formation du spray.

En effet, les augmentations, diminutions, du rapport des densités agissent respectivement sur les déplacements verticaux des plus larges structures liquides en les amplifiant, limitant. Cette dépendance modifie plusieurs indicateurs locaux tels que la distribution du volume de gouttes par taille ainsi que sa distribution verticale.

Par ailleurs, les taux d'atomisations illustrent que toutes les variations du rapport de densité

ne sont pas bénéfiques à l'atomisation et à la représentativité des simulations. En effet, le meilleur taux atteint correspond au point de fonctionnement intermédiaire. De plus, le rapprochement, plus ou moins important, des larges structures couplé aux conditions limites dégradent, plus ou moins tardivement, la représentativité des simulations.

Compléments d'informations sur l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes liquides cisailées dans un domaine périodique

B.1. Réjection des structures appliquée aux simulations en similitude

Les coalescences forcées entraînent la création puis la détection de gouttes dans les simulations à faible Weber. Ce phénomène peut se traduire par une tension de surface relevée qui dirige le processus d'atomisation vers une génération de structures plus volumineuses. Un effet supplémentaire de cette élévation est la réduction du temps de relaxation des structures vers l'état de gouttes, provoquant une détection plus précoce. Plus d'explications sont disponibles dans la section 10.4.

Cette opération de réjection est effectuée à partir des simulations réalisées dans l'étude en similitude précédente, sections 10.4 et 10.3. Les nombres sans dimension, associés aux simulations retenues, sont résumés ci-dessous, Table B.1.

$\hat{\rho}$	Re_l	Re_g	We	$\hat{\mu}$	MFR
		1581.1	23.12		0.75
		1581.1	16.82		0.75
$1.2 \cdot 10^{-2}$	598.8	1581.1	11.52	$1.79 \cdot 10^{-2}$	0.75
		1888.5	23.12		1.08
		1888.5	16.82		1.08
		2213.6	23.12		1.47

TABLE B.1. – Nombres sans dimension utilisés, réjection des gouttes.

La présence de gouttes volumineuses, induites par les conditions limites, dans les simulations à faible Weber est confirmée par le volume des gouttes, Figure B.1, le nombre des gouttes, Figure B.2, et le diamètre de Sauter, Figure B.3.

Le volume de goutte n'est modifié que pour les deux plus faibles valeurs de Weber ($We = 11.52 - 16.82$) et à des instants avancés du processus d'atomisation, $t^* > 3.0$, Figure B.1. Cette réjection des gouttes peut entraîner la perte d'une quantité significative du volume associé. Un tel exemple est visible avec le point de fonctionnement $MFR-We = 0.75-11.52$ dont le taux d'atomisation est abaissé de 30 % en fin de simulation, Figure B.1b.

Bien que les écarts de volume puissent être significatifs, le nombre de gouttes enlevées de la base de données ne l'est pas, Figure B.2. Les études de ces points de fonctionnement, décrits plus précisément sections 10.4 et 10.3, démontrent que seules quelques gouttes, minoritaires en nombre, rassemblent une large quantité de volume et sont prélevées par cette opération de réjection.

Toutefois, la modification du volume de goutte par cette opération de réjection influence le diamètre de Sauter, Figure B.3. De part sa définition, ce dernier est plus sensible à la présence de gouttes ayant un rapport volume sur surface important. Certaines fluctuations présentes à des temps d'atomisation avancés, $t^* > 3$ Figure B.3a, sont atténuées, Figure B.3b, et illustrent des

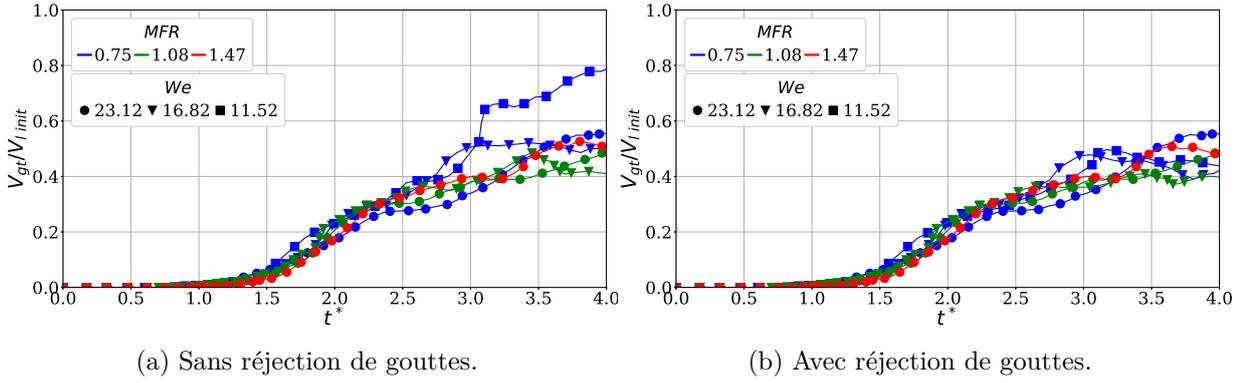


FIGURE B.1. – Volume total des gouttes.

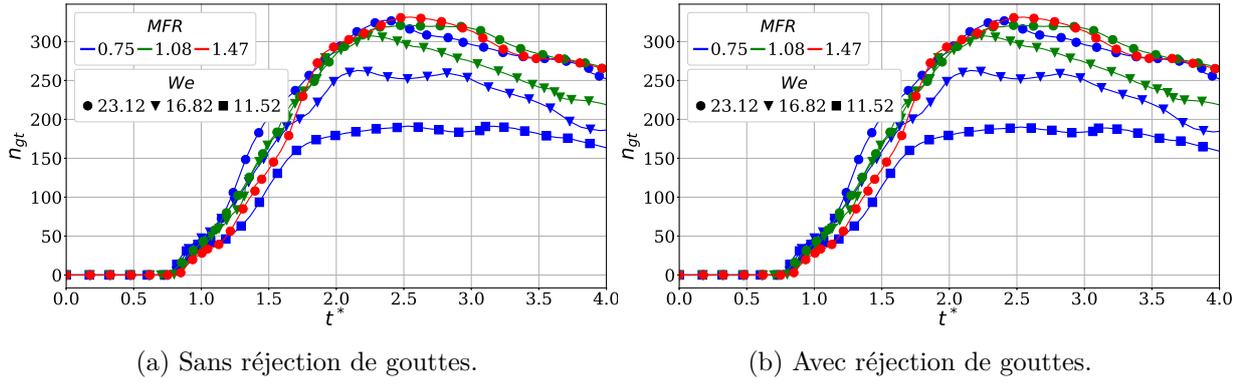


FIGURE B.2. – Nombre total des gouttes.

évolutions analogues, plus facilement modélisables.

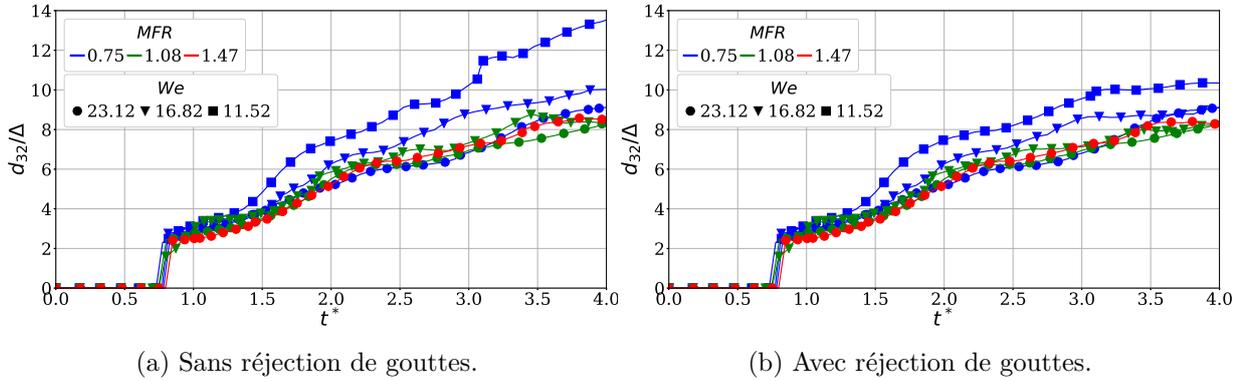
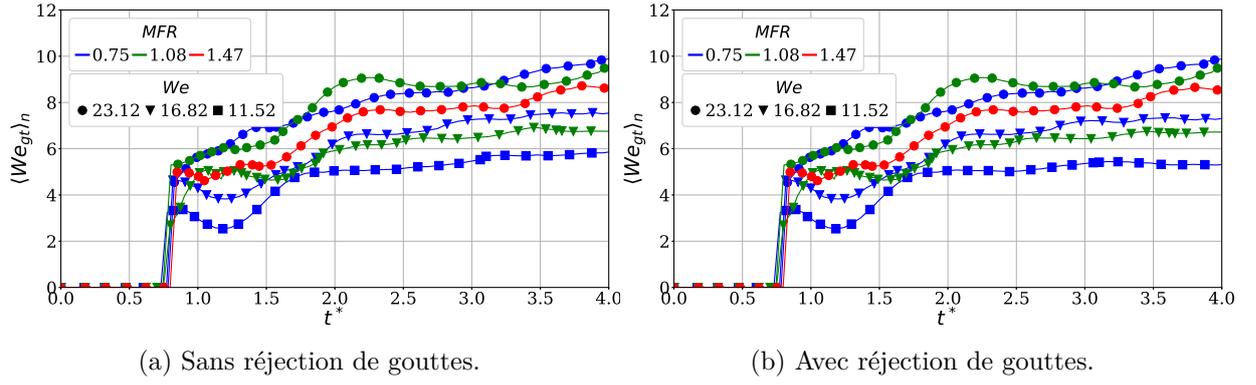


FIGURE B.3. – Diamètre de Sauter.

B.2. Weber à l'équilibre

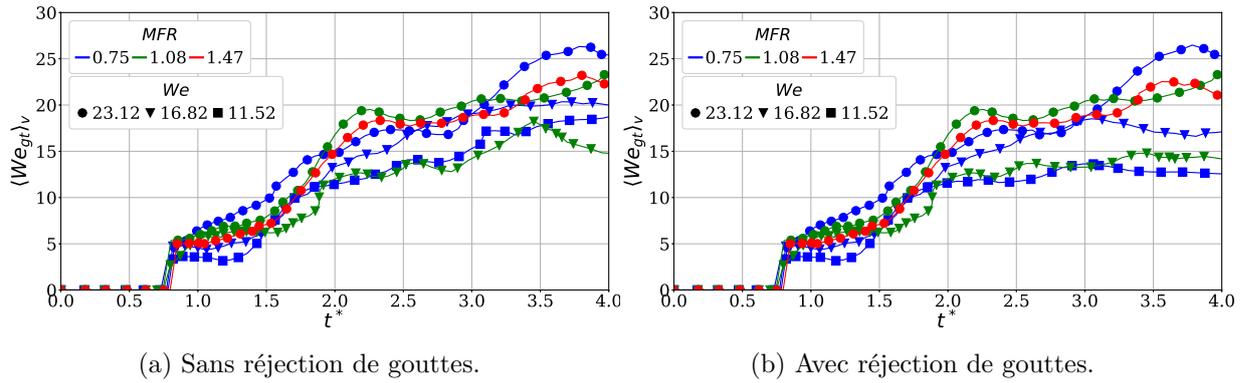
La première définition $\langle We_{gt} \rangle_n$, basée sur le nombre de gouttes, ne subit que peu de variations visibles suite à l'opération de réjection des gouttes, Figure B.4. Toutes les évolutions stagnent en atteignant un plateau dès $t^* = 2.25$. Pour cette définition du Weber $\langle We_{gt} \rangle_n$, les valeurs à l'équilibre sont relevées au temps d'équilibre, $\tau^*_{eq} = 2.5$. Ces dernières croissent lorsque le Weber initial augmente et, à contrario, sont quasiment indépendantes de la valeur du rapport des flux de quantités de mouvements initial.

Dans cette approche phénoménologique, le $\langle We_{gt} \rangle_v$ est censé être plus représentatif de l'état dynamique du spray puisque l'importance des plus petites gouttes, majoritaires en nombre, est

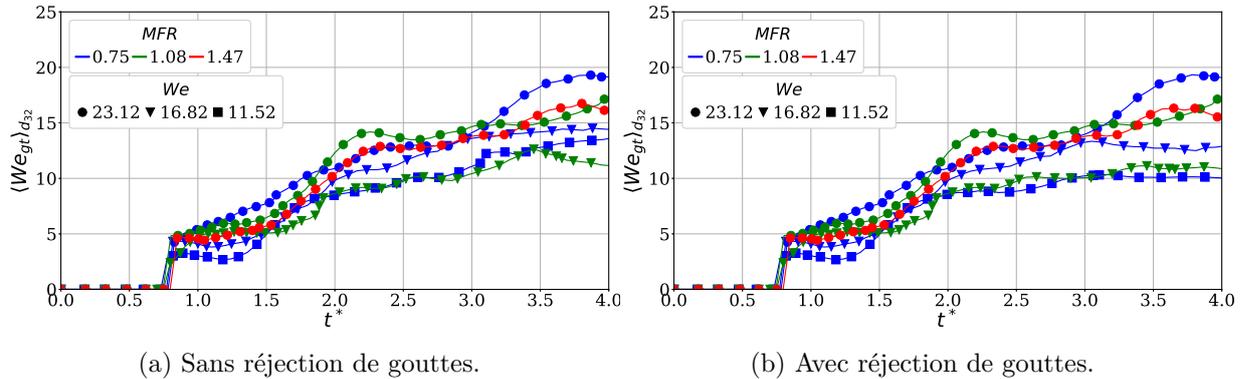

 FIGURE B.4. – $\langle We_{gt} \rangle_n$, pour le relevé du Weber à l'équilibre.

abaissée devant les plus volumineuses. Les fluctuations présentes pour cette définition du Weber sont atténuées par l'opération de réjection, Figure B.5.

Les variations associées à cette définition de Weber sont analogues avec la précédente, à savoir, une croissance jusqu'à une valeur plateau dès $t^* = 2.25$. Cependant, des fluctuations se distinguent en fin de processus d'atomisation pour les simulations ayant un grand Weber initial. Ceci illustre une génération de gouttes de plus en plus volumineuses par rapport à un spray initialement composé de petites gouttes. Malgré cela, une classification globale reste valable en fonction du Weber initial. Plus sa valeur est grande plus celles atteintes par cette nouvelle définition le deviennent, Figure B.5b.


 FIGURE B.5. – $\langle We_{gt} \rangle_v$, pour le relevé du Weber à l'équilibre.

Enfin, la dernière définition de Weber s'appuie sur une modélisation du spray par un diamètre de Sauter équivalent. Ses évolutions sont analogues à celles précédemment décrites, à savoir, avec une augmentation de cette valeur jusqu'à un seuil dépendant du Weber initial, Figure B.6.


 FIGURE B.6. – $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$, pour le relevé du Weber à l'équilibre.

Compléments d'information sur les études de nappes liquides cisillées dans un domaine réaliste

Des informations supplémentaires sur l'atomisation de nappes liquides cisillées dans un domaine réaliste sont disponibles dans cette annexe.

C.1. Analyse du cas de référence

C.1.1. Caractérisation des gouttes sortantes par paquet

Les valeurs maximales du nombre de gouttes instantané dans le domaine, $\max(n_{gt})$ Figure 12.28, et celles du nombre de gouttes sortantes cumulé, $\max(n_{gt\ cumule})$ Figure 12.31, sont comparées, pour chacun des paquets, Figure C.1. Dans cette représentation les paquets ne sont plus classifiés par cycle mais par ordre de détachement, Table C.1.

Cycle	1					2					5				
Paquet	1	2	3	4	5	1	2	3	4	1	2	3	4	5	
Ordre de détachement	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	

TABLE C.1. – Numérotation des paquets par ordre de détachement en fonction des cycles.

Quel que soit le paquet, le maximum des gouttes sortantes est supérieure au maximum du nombre de gouttes instantané. Ce résultat met en avant la bonne dispersion du liquide dans le domaine de simulation avec peu de collisions des gouttes, en interne. En effet, dans le cas contraire d'une dispersion confinée, les collisions internes seraient très nombreuses avec un nombre cumulé de gouttes sortantes qui devrait être inférieur au maximum du nombre de gouttes instantané. Les écarts entre ces deux maximums, instantané en interne et cumulé, varient fortement en fonction du paquet analysé (entre 6 et 261 gouttes). Cela provient du volume maximal du paquet qui, en se fragmentant, génère des structures liquides pouvant être volumineuses. Ces dernières sont advectées moins rapidement du fait de leur grande inertie ce qui rallonge la phase de décroissance et abaisse le maximum instantané du nombre de gouttes.

Les valeurs maximales des taux d'atomisation instantanés et cumulés sont illustrées Figure C.2. Quel que soit le paquet retenu, les valeurs maximales atteintes sont supérieures lors de l'utilisation des gouttes sortantes. Ces gains varient, eux aussi, en fonction du volume maximal du paquet, entre 0 et 22 points supplémentaires. De la même manière que pour l'analyse du nombre de gouttes, ce sont les plus volumineux paquets qui sont avantagés par la prise en compte des gouttes sortantes, avec des gains de 17 points en moyenne.

Les valeurs maximales atteintes par ces deux diamètres sont résumées Figure C.3. Celles obtenues à partir des gouttes sortantes sont toutes inférieures à celles obtenues en interne. Cela signifie que l'estimation de ce diamètre réalisée sur le spray interne n'est pas suffisante pour représenter fidèlement le spray formé dans son intégralité.

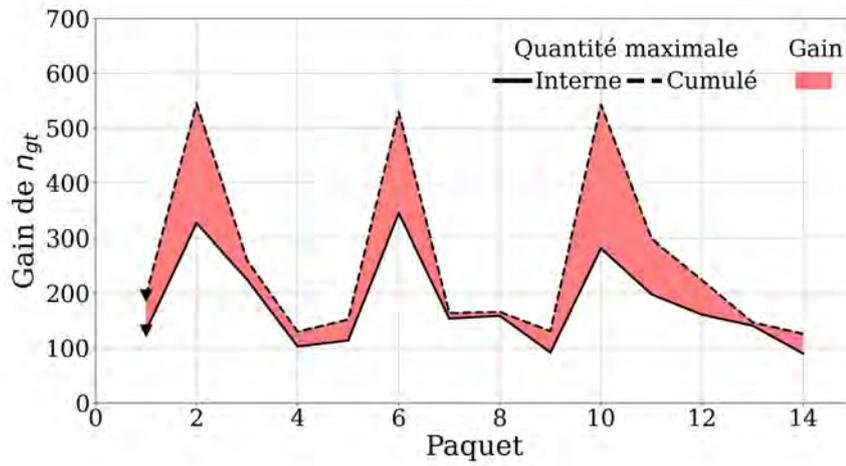


FIGURE C.1. – Gain du nombre de gouttes par paquet, cas de référence.

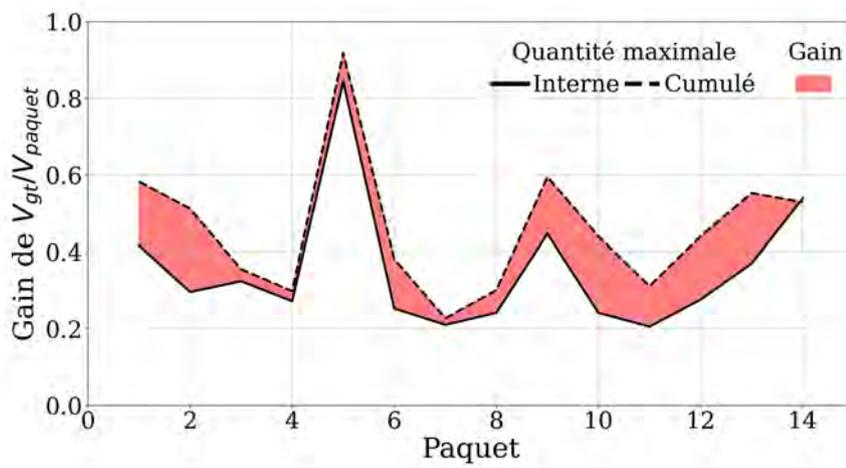


FIGURE C.2. – Gain du volume de gouttes par paquet, cas de référence.

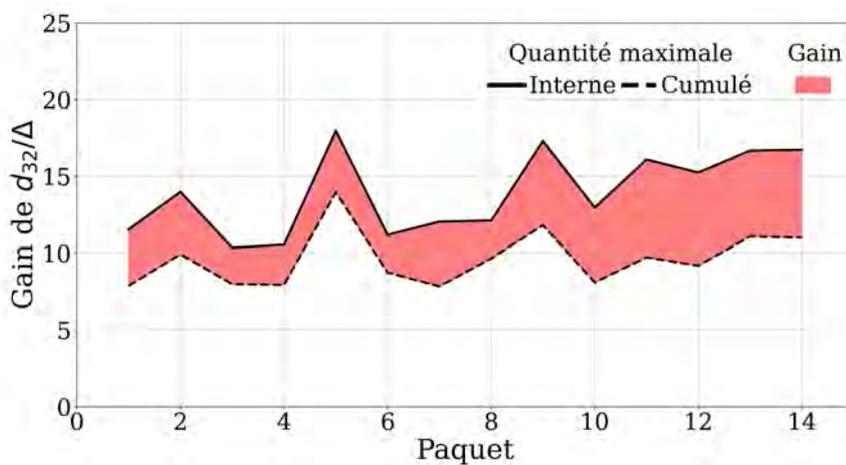


FIGURE C.3. – Gain du diamètre de Sauter de gouttes par paquet, cas de référence.

C.1.2. Analyse complémentaire des processus d'atomisations associés à deux longueurs d'ondes

La présence simultanée de paquets liquides dans le domaine numérique complexifie l'analyse, la compréhension et la représentation de leurs processus respectifs d'atomisation. Une analyse plus détaillée a été faite sur deux paquets, représentatifs d'une grande et petite longueur d'onde car leur processus d'atomisation semble, a priori, différent. Ces derniers sont les paquets 2 et 5 du premier cycle représentés par la suite respectivement à gauche et à droite sur les Figures C.4 et C.5.

Pour comprendre le déroulement des processus d'atomisation, les indicateurs volume et nombre d'amas sont employés en utilisant les catégories citées précédemment : Goutte, Ligament, Autre pour les amas Interne et Bord pour les restants, section 12.7.3. Ainsi, l'indicateur associé à chacune de ces catégories est relié à la surface colorée correspondante, rouge pour les Gouttes, verte pour les Ligaments, bleue pour Autre et grise pour Bord. Les hachures obliques représentent les quantités instantanées dans le domaine numérique alors que celles verticales illustrent les quantités cumulées au cours de leur sortie. À chaque instant, la somme des contributions internes (Goutte, Ligament, Autre et Bord Instantané) est représentative de l'intérieur du domaine numérique. La contribution des gouttes sortantes (Cumulé) s'accroît avec la sortie des gouttes et est additionnée à la somme des contributions internes.

C.1.2.1. Répartition du volume des amas par catégorie

Quel que soit le volume maximal du paquet analysé, son taux d'atomisation interne maximal, c'est-à-dire le pourcentage de volume de gouttes, est atteint lorsque le volume total du paquet commence à décroître, Figure C.4.

Pour le premier paquet, ce maximum apparaît relativement tôt, à $t^* = 18$, puisque la totalité du volume liquide ne sort du domaine qu'à $t^* = 22.5$. À l'inverse, pour un paquet moins volumineux, ce maximum se situe juste avant que la totalité du liquide ne quitte le domaine, à $t^* = 26$.

Cette remarque illustre des productions de gouttes différentes dans ces deux paquets. Pour le plus volumineux, l'existence de cette phase de décroissance démontre que certaines gouttes quittent le domaine bien plus tôt que d'autres. Cela provient de l'écart d'inertie entre les petites gouttes produites lors du détachement de la nappe débitante et celles, plus volumineuses, générées plus tardivement par les ruptures de ligaments. À l'opposé, pour le moins volumineux paquet, la présence du maximum de volume de gouttes juste avant la sortie du domaine illustre que toutes les gouttes quittent le domaine dans un temps très limité. Ces dernières proviennent d'un processus de fragmentation de ligaments, ou d'autres structures, qui n'a pas subi de retard durant son advection. En effet, les inerties des structures des plus petits paquets (gouttes, ligaments, autres et bord) sont bien moins grandes que celles des paquets volumineux car, en comparaison, le volume maximal atteint est bien plus faible, Table C.2.

Cycle - Paquet	1 - 2	1 - 5
$V_{paquet}/V_{l\ init}$	1.4	0.45

TABLE C.2. – Volume maximal détaché pour les deux paquets analysés.

Les quantités de volumes adimensionnalisées dans la catégorie ligament sont analogues dans les deux paquets analysés, Figure C.4. Toutefois, le volume qui y est associé est bien plus important dans le cas de grande longueur d'onde puisque le volume maximal du paquet, provenant du volume détaché de la nappe débitante, est supérieur, Table C.2. D'autre part, la proportion de volume des amas de la catégorie bord chute lorsque celle des ligaments augmente. Cela signifie que les volumineux amas en bord de domaine, se rompent en de multiples amas internes associés à la catégorie ligament et goutte.

Dès le détachement du paquet de la nappe liquide, une large portion de son volume liquide est initialement affectée à la catégorie bord. Pour rappel, cela signifie que les amas qui y sont associés possèdent au moins un côté de leurs enveloppes en commun avec les bornes du domaine de simulation. Les deux paquets analysés illustrent que cette quantité diminue durant leur advection. Pour le moins volumineux, paquet 5 à droite, cette quantité de volume est totalement convertie en ligament puis en gouttes. À l'opposé, pour le plus volumineux, paquet 2 à gauche, cette quantité diminue mais reste significative jusqu'au début des sorties d'amas. Cela démontre que le temps caractéristique de rupture des amas de cette catégorie est supérieur au temps total d'advection.

Enfin, la dernière information disponible sur ces graphes concerne l'accumulation des gouttes sortantes du domaine. L'allure de cette quantité démontre que les gouttes du premier paquet sortent du domaine avant que la totalité du paquet ne soit atomisé. C'est le contraire qui se produit pour le second paquet. En effet, le volume de gouttes cumulé ne fait que croître et devient significatif lorsque le volume maximal de gouttes instantané est atteint dans le domaine. Cela se produit à la moitié de la durée d'existence du premier paquet et à la toute fin du second. Par ailleurs, les volumes de gouttes cumulés sont maximisés en fin de processus. L'écart entre les deux valeurs atteintes illustrent les différences entre ces deux processus d'atomisation. Une grande longueur, n'ayant pas eu suffisamment de temps pour que tout ces amas se fragmentent complètement, n'atteint qu'un maximum de 51 % d'atomisation tandis qu'un paquet plus petit se convertit plus largement en gouttes avec un maximum final de 92 %.

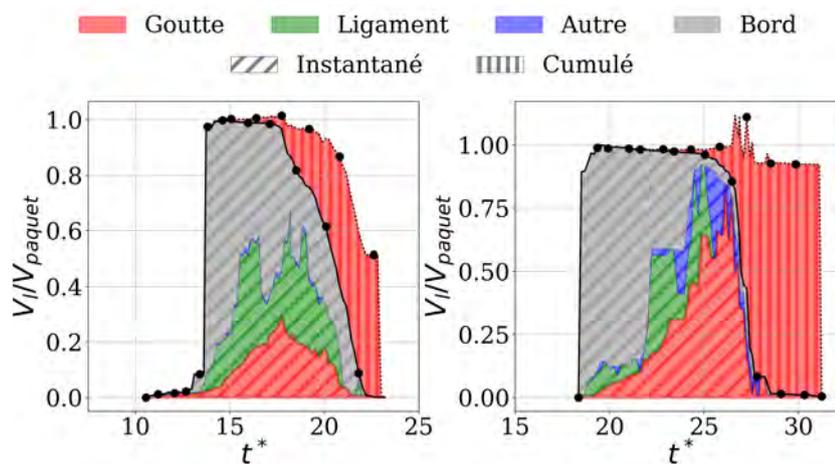


FIGURE C.4. – Répartition du volume des structures liquides par catégorie pour les paquets 2 (gauche) et 5 (droite).

C.1.2.2. Répartition du nombre d'amas par catégorie

La répartition du nombre d'amas par catégorie conclut cette analyse des deux paquets, Figure C.5.

Bien que les amas de type ligament, autre et bord possèdent une quantité significative de volume, leurs nombres restent très limités en comparaison de celui des gouttes. De plus, le nombre maximal de ces dernières varie entre ces deux paquets et peut être relié au volume maximal associé au paquet.

Les nombres de gouttes cumulés ne cessent de croître jusqu'aux sorties de la dernière goutte de chaque paquet. Le nombre de gouttes cumulé final est bien supérieur au maximum instantané, ce qui démontre l'intérêt de les prendre en compte. Cet intérêt est particulièrement renforcé lorsque le volume maximal du paquet est important, puisqu'un grand nombre de gouttes sortent du domaine avant que la totalité du paquet ne soit atomisée.

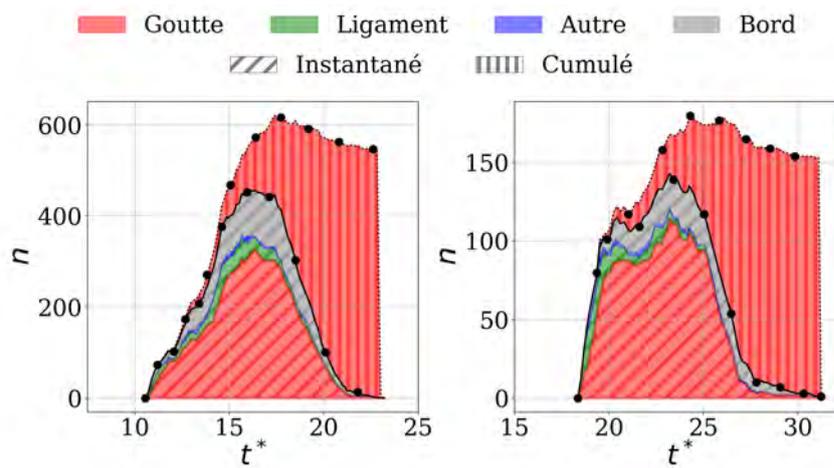


FIGURE C.5. – Répartition du nombre de structures liquides par catégorie pour les paquets 2 (gauche) et 5 (droite).

C.2. Effet de la géométrie, Δ et L_x

C.2.1. Caractérisation des gouttes sortantes

Les valeurs maximales du nombre de gouttes instantanées en interne, $\max(n_{gt})$ Figure 13.12, et celles du nombre de gouttes sortantes, cumulées $\max(n_{gt\ cumulative})$, Figure 13.15, sont illustrées pour chaque paquet Figure C.6.

La prise en compte des gouttes sortantes permet de recueillir un plus grand nombre de gouttes que celles présentes instantanément à l'intérieur du domaine. Ce constat est particulièrement visible lorsque le paquet est volumineux puisque les grands écarts d'inertie favorisent les sorties décalées entre les premières et dernières gouttes. Les valeurs négatives présentes pour le dernier point de configuration démontre que l'arrêt de cette simulation s'est effectué trop tôt, bien avant que les gouttes des deux derniers paquets ne puissent quitter le domaine.

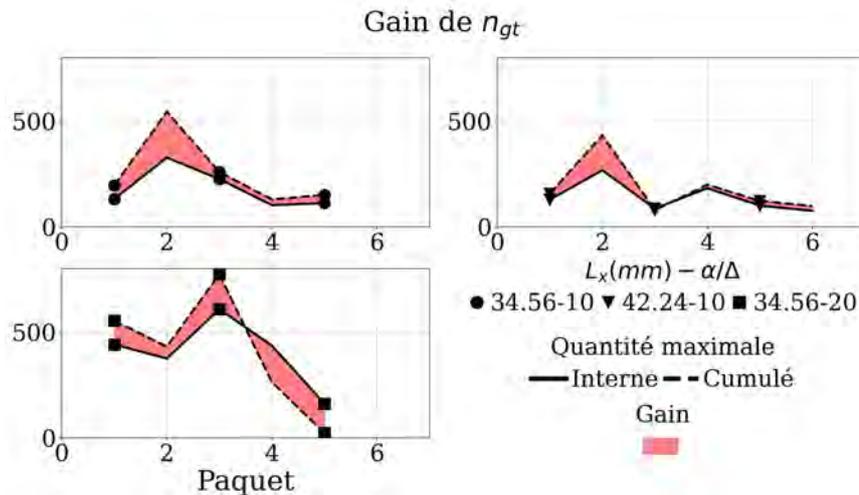


FIGURE C.6. – Gain du nombre de gouttes par paquet, influence des paramètres géométriques.

Le maximum instantané du volume de gouttes dans le domaine, $\max(V_{gt})$ Figure 13.11, et celles du volume de gouttes sortantes cumulées, $\max(V_{gt\ cumulative})$ Figure 13.16, sont illustrées Figure C.7.

L'allongement du domaine de simulation permet d'atteindre des taux d'atomisation instantanés plus élevés. Couplés à la prise en compte des gouttes sortantes, ces taux d'atomisation continuent de s'accroître sur l'ensemble des paquets émis. Les gains obtenus pour la simulation rallongée surclassent ceux du cas de référence avec une moyenne de 19.7 points supplémentaire contre 10.8 points pour le cas de référence. Les valeurs relevées de la dernière simulation, notamment celles négatives, illustrent que l'ensemble des paquets détectés n'a pas atteint la sortie du domaine avant que la simulation ne soit terminée.

Les valeurs maximales instantanées de cet indicateur dans le domaine, $\max(d_{32}/\Delta_{min})$ Figure 13.13, ainsi que les valeurs reliées aux gouttes sortantes cumulées, $\max(d_{32\ cumulative}/\Delta)$ Figure 13.17, sont renseignées Figure C.8.

Cette fois-ci, la contribution des gouttes sortantes permet une meilleure estimation de ce diamètre caractéristique qui se répercute au-travers d'une baisse significative de cet indicateur. En se basant sur la plus petite des résolutions, Δ_{min} , les gains (négatifs) sont en moyenne de 13.6 points pour la simulation rallongée et de 6.6 points pour le cas de référence.

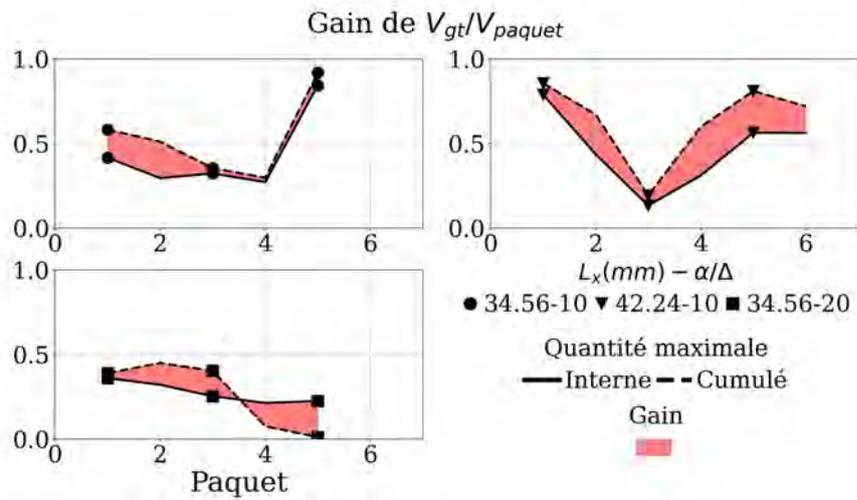


FIGURE C.7. – Gain du volume de gouttes par paquet, influence des paramètres géométriques.

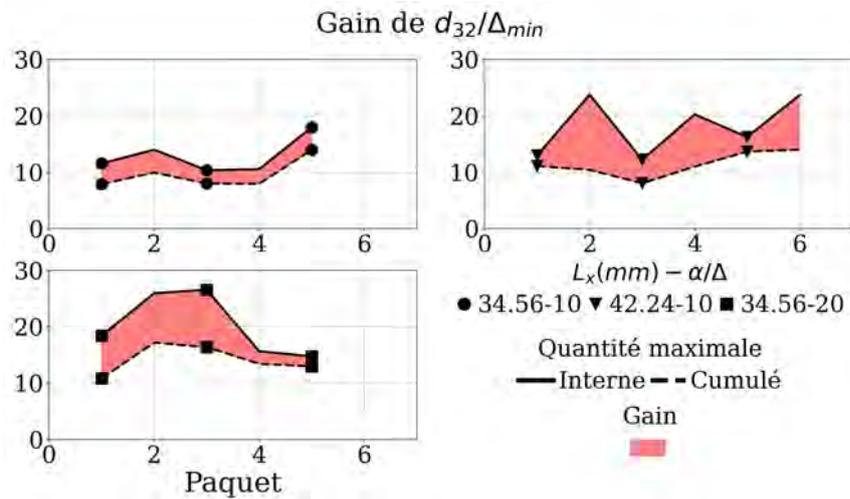


FIGURE C.8. – Gain du diamètre de Sauter par paquet, influence des paramètres géométriques.

C.3. Étude en similitude, $MFR-We$

C.3.1. Caractérisation des gouttes sortantes

Les valeurs maximales du nombre de gouttes instantanées internes, $\max(n_{gt})$ Figure 14.13, et celles du nombre de gouttes sortantes cumulées, $\max(n_{gt\ cumule})$ Figure 14.16, sont mises en lumière Figure C.9. Au sein de chaque simulation, les principaux gains sont réalisés pour les plus volumineux paquets puisque ce gain est décuplé par le surplus d'énergie de la phase gazeuse.

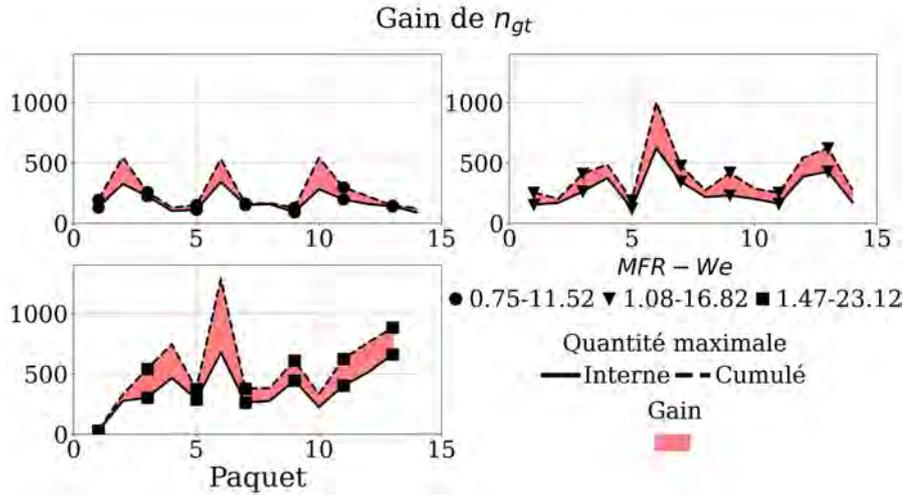


FIGURE C.9. – Gain du nombre de gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$.

Les taux d'atomisation instantanée des gouttes internes, $\max(V_{gt})$ Figure 14.12, ceux des gouttes sortantes, $\max(V_{gt\ cumule})$ Figure 14.17, sont illustrés pour chaque paquet, Figure C.10.

Les différents cycles se distinguent dans chacune des simulations par le dernier paquet généré, qui possède un des taux d'atomisation interne parmi les plus élevés. Les gains de volume de gouttes se concentrent sur les paquets volumineux tout en étant significatifs sur les plus petits. Les taux d'atomisation interne maxima sont, en moyenne, plus élevés avec l'augmentation des nombres sans dimension. Ce constat est amplifié avec les gouttes sortantes, dont les gains sont, eux aussi, renforcés par cet apport d'énergie.

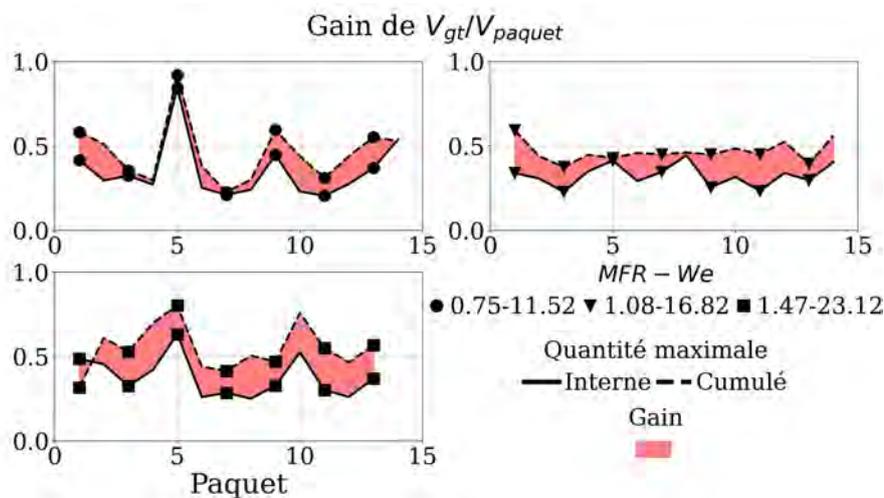


FIGURE C.10. – Gain du volume de gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$.

Les valeurs ainsi que les écarts obtenus entre les grandeurs internes instantanées, $\max(d_{32}/\Delta)$ Figure 14.14, et celles cumulées, $\max(d_{32\ cumule}/\Delta)$ Figure 14.18, sont illustrés pour chaque paquet Figure C.11.

L'utilisation des gouttes sortantes permet d'estimer ce diamètre sur un ensemble de gouttes plus important, améliorant ainsi son estimation. Quel que soit le paquet, le gain (négatif) est significatif et permet de rapprocher la valeur obtenue de celle mesurée par l'expérience. L'augmentation de l'apport d'énergie à la phase liquide se traduit, au-travers de cet indicateur, par des diamètres caractéristiques qui diminuent. Cela signifie que les sprays monodisperses équivalents ont un diamètre de plus petite taille quand l'apport d'énergie cisailant augmente.

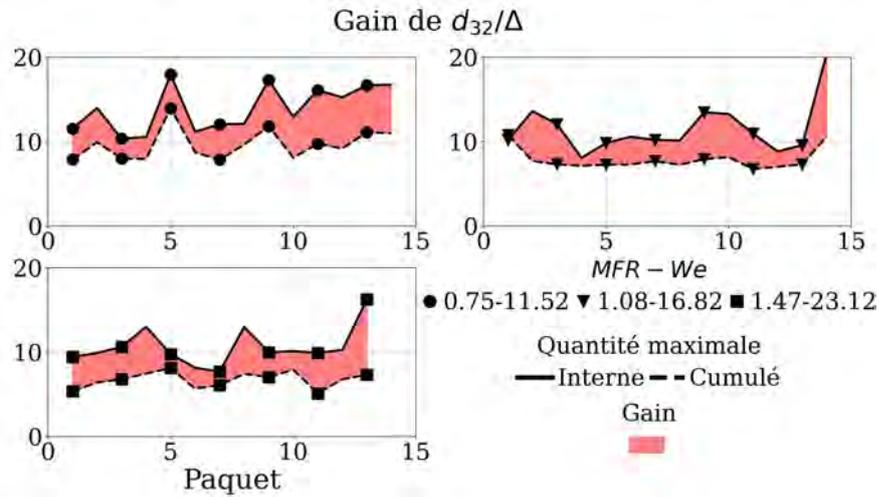


FIGURE C.11. – Gain du diamètre de Sauter de gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$.

Table (exhaustive) des matières

Introduction	1
I. Phénomènes physiques et modélisations de l'atomisation assistée	5
1. Historique et applications de l'atomisation assistée	7
1.1. Une définition de l'atomisation assistée	8
1.2. Tour d'horizon et enjeux des applications de l'atomisation assistée	8
1.2.1. Peinture artistique et industrielle	8
1.2.2. Purification de produits pharmaceutiques, agro-alimentaires et céramiques	9
1.2.3. Poudre en métallurgie	9
1.2.4. Injection automobile	10
1.2.5. Combustion moteur aéronautique	11
1.2.6. Propulsion liquide dans le spatial	13
1.3. Catégories d'injecteurs	14
1.3.1. Injecteurs pressurisés	14
1.3.2. Injecteurs diphasiques de type airblast	15
2. Notions fondamentales et simulations	17
2.1. Compréhension du processus d'atomisation assistée	19
2.1.1. Instabilités interfaciales	19
2.1.1.1. Composante longitudinale	19
2.1.1.2. Composante transverse	21
2.1.2. Nombres adimensionnels	23
2.1.3. Classification des régimes d'atomisations	23
2.1.3.1. Régimes d'atomisations primaires	23
2.1.3.2. Régimes d'atomisations secondaires	26
2.2. Approche numérique et modélisations	28
2.2.1. Modélisation des équations de Navier-Stokes	28
2.2.1.1. Formalisme DNS	30
2.2.1.2. Formalisme LES	30
2.2.1.3. Formalisme RANS	31
2.3. Simulations numériques de l'atomisation assistée	32
2.3.1. Simulation numérique directe, DNS	32
2.3.1.1. Suivi d'interface	32
2.3.1.2. Capture d'interface	33
2.3.1.3. Exemples d'applications	34
2.3.2. Approches phénoménologiques	39
2.3.2.1. Approches stochastiques	39
2.3.2.1.1. Corrélations d'Elkottb	39
2.3.2.1.2. Corrélations d'Hiroyasu	39
2.3.2.1.3. Modèle Taylor Analogy Breakup	40
2.3.2.1.4. Modèle WAVE	41
2.3.2.1.5. Simulations avec modèles stochastiques	43
2.3.2.2. Modèle ELSA	44
3. Origine et modélisation de la densité d'interface pour l'atomisation	47
3.1. Définitions et généralités	48
3.1.1. Équation de transport d'interface réactive et première modélisation	50
3.1.2. Construction de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz	50

3.2.	Modélisations avec hypothèses de phase dispersées	51
3.2.1.	Modèle de Iyer	51
3.2.1.1.	Destruction par évaporation	51
3.2.1.2.	Production par rupture	52
3.2.1.3.	Destruction par coalescence	52
3.3.	Modélisations sans hypothèses de phases dispersées	53
3.3.1.	Modèle de Vallet	53
3.3.1.1.	Production par l'étirement des grandes échelles	54
3.3.1.2.	Production par l'étirement des petites échelles	54
3.3.1.3.	Destruction par coalescence	54
3.3.2.	Modèle de Jay	55
3.3.2.1.	Production par instabilité interfaciale	55
3.3.2.2.	Production par rupture	56
3.3.2.3.	Destruction par évaporation	56
3.3.3.	Modèle de Lebas	56
3.3.3.1.	Production initiale	58
3.3.3.2.	Production causée par la turbulence	58
3.3.3.3.	Destruction par collisions et coalescences	58
3.3.3.4.	Destruction par rupture secondaire	59
3.3.3.5.	Destruction par évaporation	60
3.3.4.	Modèle de Chesnel	60
3.3.4.1.	Densité d'interface résolue	62
3.3.4.2.	Production interne	62

II. Outils numériques pour la simulation et l'analyse de l'atomisation assistée **65**

4. Résolution directe des équations de Navier-Stokes diphasiques incompressibles avec le code DYJEAT **67**

4.1.	Contexte et origine	68
4.2.	Modèle physique	68
4.2.1.	Équations de Navier-Stokes incompressibles	68
4.2.2.	Interface et conditions de saut	69
4.3.	Résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles en diphasiques sur un maillage décentré	69
4.3.1.	Maillage MAC	70
4.3.2.	Méthode de projection dans la description monophasique	70
4.3.3.	Traitement numérique	71
4.3.4.	Méthode de suivi d'interfaces	72
4.3.4.1.	Principe de la méthode LS	72
4.3.4.2.	Principe de la méthode VOF	73
4.3.4.3.	Principe de la méthode CLSVOF	74
4.4.	Couplage avec les conditions de saut	77
4.4.1.	Propriétés géométriques de l'interface	78
4.4.2.	Méthode Ghost-Fluid	78
4.4.3.	Saut de viscosité	81
4.5.	Conditions aux limites	81
4.6.	Intégration temporelle	81
4.7.	Condition de stabilité temporelle	82
4.8.	Conclusion	82

5. Algorithme de détection liquide **85**

5.1.	Contexte	86
------	--------------------	----

5.2.	La détection liquide dans les outils numériques	86
5.3.	Fonctionnement de l'algorithme	87
5.3.1.	Balilage des cellules	88
5.3.2.	Identification de l'état des sommets des cellules	89
5.3.3.	Diffusion d'une balise commune par structure	90
5.3.4.	Propagation des balises entre processeurs	91
5.3.5.	Collecte des données de chaque structure	94
5.4.	Analyse et classification des structures	94
5.5.	Validation de l'algorithme	96
5.5.1.	Calcul de surface	96
5.5.1.1.	Goutte statique	96
5.5.1.2.	Cube statique déformé par sa tension de surface	97
5.5.2.	Détection de structures	98
5.5.2.1.	Spray de gouttes monodisperses	98
5.5.2.2.	Spray de gouttes polydisperse	99
5.6.	Performance	100
5.6.1.	Temps d'exécution	100
5.6.2.	Speedup	101
5.7.	Analyse d'un instant d'une simulation DNS d'atomisation assistée	102
5.7.1.	Configuration d'étude	103
5.7.2.	Analyse qualitative des structures	103
5.8.	Conclusion sur l'algorithme de détection liquide	105
III. Similitude par rapport à l'expérience et géométries		107
6. Objectifs, contexte expérimental et méthodologie de similitude		109
6.1.	Objectifs des simulations numériques	110
6.2.	Contexte expérimental	111
6.3.	Points de fonctionnements et mesures d'expériences	112
6.4.	Méthodologie de similitude	114
7. Résultats antérieurs et configurations géométriques		115
7.1.	Résultats et validations antérieurs	116
7.2.	Géométrie du domaine périodique	116
7.3.	Géométrie du domaine réaliste	118
IV. Simulations et analyses de nappes liquides cisillées dans un domaine périodique		121
8. Simulation et analyse du cas de référence		125
8.1.	Choix des longueurs d'ondes	126
8.1.1.	Longueur d'onde longitudinale	126
8.1.2.	Longueur d'onde transverse	127
8.2.	Nombres sans dimension et conditions initiales	128
8.3.	Géométrie et maillage	128
8.4.	Temps caractéristique	129
8.5.	Observations du processus d'atomisation	129
8.6.	Caractéristiques de l'atomisation	131
8.6.1.	Indicateurs globaux	131
8.6.2.	Indicateurs locaux	133
8.7.	Diamètre caractéristique	134
8.8.	Conclusion de l'étude du cas de référence	135

9. Influence des paramètres géométriques	137
9.1. Introduction	138
9.2. Effet de la résolution, Δ	138
9.2.1. Géométrie et maillage	138
9.2.2. Observations des processus d'atomisation	138
9.2.3. Caractéristiques de l'atomisation	141
9.2.3.1. Indicateurs globaux	141
9.2.3.2. Indicateurs locaux	141
9.2.4. Diamètre caractéristique	142
9.2.5. Conclusion	143
9.3. Influence du cloisonnement vertical, L_y	144
9.3.1. Géométries et maillages	144
9.3.2. Observations des processus d'atomisations	144
9.3.3. Caractéristiques de l'atomisation	145
9.3.3.1. Indicateurs globaux	145
9.3.3.2. Indicateurs locaux	147
9.3.4. Diamètre caractéristique	147
9.3.5. Conclusion	148
9.4. Conclusion sur l'influence des paramètres géométriques	149
10. Étude en similitude par rapport à l'expérience	151
10.1. Introduction	152
10.2. Conservation des couples initiaux $MFR-We$	152
10.2.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	152
10.2.2. Observations des processus d'atomisation	152
10.2.3. Caractéristiques de l'atomisation	154
10.2.3.1. Indicateurs globaux	154
10.2.4. Diamètres caractéristiques	155
10.2.5. Conclusion	156
10.3. Effet du rapport des flux de quantité de mouvements, MFR	158
10.3.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	158
10.3.2. Observations des processus d'atomisation	158
10.3.3. Caractéristiques de l'atomisation	160
10.3.3.1. Indicateurs globaux	160
10.3.4. Diamètre caractéristique	160
10.3.5. Conclusion	161
10.4. Influence du Weber, We	162
10.4.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	162
10.4.2. Observations des processus d'atomisation	162
10.4.3. Caractéristiques de l'atomisation	164
10.4.3.1. Indicateurs globaux	164
10.4.4. Diamètres caractéristiques	165
10.4.5. Conclusion	166
10.5. Conclusion des études réalisées en similitude par rapport aux expériences	167
11. Exploitations des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine périodique	169
11.1. Corrélations comportementales	170
11.1.1. Temps caractéristique du processus d'atomisation	170
11.1.2. Intensité de surface produite et diamètres caractéristiques	171
11.1.3. Conclusion	173

11.2. Paramétrage du modèle d'atomisation LES	174
11.2.1. Réjection des structures générées par les conditions limites	174
11.2.1.1. Construction d'un volume seuil	175
11.2.2. Construction des Weber caractéristiques	175
11.2.2.1. Weber basé sur le nombre de gouttes	175
11.2.2.2. Weber basé sur le volume de gouttes	176
11.2.2.3. Weber basé sur le diamètre de Sauter	176
11.2.2.3.1. Hypothèses de modélisation	176
11.2.2.3.2. Définition et construction du Weber	177
11.2.3. Détermination du temps et Weber d'équilibre	178
11.2.3.1. Temps de retour à l'équilibre	179
11.2.3.2. Weber à l'équilibre	180
11.2.4. Conclusion	182
11.3. Conclusion sur l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine périodique	183

V. Simulations et analyses de nappes liquides cisillées dans un domaine réaliste 185

12. Simulation du cas de référence	189
12.1. Nombres sans dimension et conditions initiales	191
12.2. Géométrie et maillage	191
12.3. Calcul des longueurs d'ondes	192
12.4. Calcul du temps caractéristique	193
12.5. Observations du déroulement de l'atomisation	193
12.6. Caractérisation générale du processus d'atomisation	195
12.6.1. Indicateurs globaux	195
12.6.2. Indicateurs locaux	196
12.7. Suivi de structures liquides par longueur d'ondes d'émission	198
12.7.1. Suivi des amas par approximation point particule	199
12.7.2. Lien d'affiliation	203
12.7.3. Catégorisation des amas	205
12.7.4. Identification et séparation des paquets	207
12.8. Caractérisation temporelle du processus d'atomisation	208
12.8.1. Caractérisation générale des paquets	208
12.8.2. Présence des ligaments	210
12.8.3. Caractérisation des gouttes	211
12.9. Analyse des gouttes sortantes	213
12.9.1. Détection de sortie des gouttes	213
12.9.2. Définition d'un Weber inspiré des mesures expérimentales	213
12.9.3. Reconstruction de la vitesse gaz au centre de gravité d'une goutte	213
12.9.4. Weber des gouttes sortantes	214
12.9.5. Caractérisation des gouttes sortantes par paquet	215
12.10. Comparaison avec l'expérience	216
12.10.1. Moyenne par cycles	216
12.10.2. Moyenne sur l'ensemble de la simulation	217
12.11. Conclusion de l'étude du cas de référence	218
13. Influence des paramètres géométriques	221
13.1. Introduction	222
13.2. Géométrie et maillage	222
13.3. Longueurs d'ondes	223
13.4. Observations du déroulement de l'atomisation	224

13.5. Caractérisation des processus d'atomisation par paquet	226
13.5.1. Caractérisation générale des paquets	226
13.5.2. Présence des ligaments	227
13.5.3. Caractérisation des gouttes	228
13.6. Caractérisation des gouttes sortantes	229
13.7. Comparaison avec l'expérience	231
13.8. Conclusion sur l'influence des paramètres géométriques	232
14. Étude en similitude par rapport à l'expérience	233
14.1. Introduction	234
14.2. Nombres sans dimension et conditions initiales	234
14.3. Longueurs d'ondes	234
14.4. Observations du déroulement de l'atomisation	236
14.5. Caractérisation des processus d'atomisation par paquet	237
14.5.1. Caractérisation générale des paquets	237
14.5.2. Présence des ligaments	239
14.5.3. Caractérisation des gouttes	239
14.6. Analyse des gouttes sortantes	241
14.7. Comparaison avec l'expérience	243
14.7.1. Moyenne par cycle	243
14.7.2. Moyenne sur l'ensemble de la simulation	243
14.8. Conclusion sur l'étude en similitude par rapport à l'expérience	244
15. Exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine réaliste	245
15.1. Comparaison avec les expériences	246
15.1.1. Longueur de rupture	246
15.1.2. Mesures fréquentielles	248
15.1.3. Corrélation du diamètre de Sauter	250
15.1.4. Conclusion	251
15.2. Paramétrage du modèle LES	253
15.2.1. Temps d'équilibre caractéristique	253
15.2.2. Weber d'équilibre	256
15.2.2.1. Weber d'équilibre basé sur le nombre de gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_n$	256
15.2.2.2. Weber d'équilibre pondéré par le volume de gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_v$	256
15.2.2.3. Weber d'équilibre basé sur le diamètre de Sauter des gouttes, $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$	257
15.2.2.4. Corrélation des Weber d'équilibre	258
15.2.3. Conclusion	261
15.3. Conclusion à propos de l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes dans un domaine réaliste	262
Conclusion générale	263
A. Compléments d'informations sur les études de nappe liquides cisailés dans un do- maine périodique	269
A.1. Analyse du cas de référence	269
A.1.1. Indicateurs globaux	269
A.1.2. Indicateurs locaux	269
A.1.3. Diamètre caractéristique	271
A.2. Effet de la résolution, Δ	272
A.2.1. Indicateurs globaux	272
A.2.2. Indicateurs locaux	273
A.2.3. Diamètre caractéristique	274

A.3.	Influence du cloisonnement vertical, L_y	276
A.3.1.	Indicateurs globaux	276
A.3.2.	Indicateurs locaux	277
A.3.3.	Diamètre caractéristique	277
A.4.	Conservation des couples initiaux $MFR-We$	279
A.4.1.	Indicateurs globaux	279
A.4.2.	Indicateurs locaux	279
A.5.	Effet du rapport des flux de quantités de mouvements, MFR	282
A.5.1.	Indicateurs globaux	282
A.5.2.	Indicateurs locaux	283
A.5.3.	Diamètre caractéristique	284
A.6.	Influence du Weber, We	286
A.6.1.	Indicateurs globaux	286
A.6.2.	Indicateurs locaux	286
A.6.3.	Diamètres caractéristiques	288
A.7.	Modification du rapport des densités, $\hat{\rho}$	290
A.7.1.	Nombres sans dimension et conditions initiales	290
A.7.2.	Observations des processus d'atomisations	290
A.7.3.	Indicateurs globaux	292
A.7.4.	Indicateurs locaux	294
A.7.5.	Diamètres caractéristiques	296
A.7.6.	Conclusion	297
B.	Compléments d'informations sur l'exploitation des résultats issus de l'atomisation des nappes liquides cisillées dans un domaine périodique	299
B.1.	Réjection des structures appliquée aux simulations en similitude	299
B.2.	Weber à l'équilibre	300
C.	Compléments d'information sur les études de nappes liquides cisillées dans un domaine réaliste	303
C.1.	Analyse du cas de référence	303
C.1.1.	Caractérisation des gouttes sortantes par paquet	303
C.1.2.	Analyse complémentaire des processus d'atomisations associés à deux longueurs d'ondes	305
C.1.2.1.	Répartition du volume des amas par catégorie	305
C.1.2.2.	Répartition du nombre d'amas par catégorie	306
C.2.	Effet de la géométrie, Δ et L_x	308
C.2.1.	Caractérisation des gouttes sortantes	308
C.3.	Étude en similitude, $MFR-We$	310
C.3.1.	Caractérisation des gouttes sortantes	310
	Table (exhaustive) des matières	313
	Liste des Figures	321
	Liste des Tableaux	329
	Nomenclature	331
	Bibliographie	337
	Résumé	351

Liste des Figures

0.1. Injection cross-flow, Herrmann [77]	1
0.2. Simulation LES d'une chambre de combustion, Dorey [50]	1
0.3. Modélisation de l'atomisation	2
1.1. Représentation "des chevaux ponctués" du Pech-Merle datant de -25 000 ans, [3].	8
1.2. Félines Fight Club, Krem 2014, [5].	8
1.3. Thermolaquage de pièces, [8].	8
1.4. Schématisation d'une tour de séchage, [10].	9
1.5. Création des poudres, [4].	10
1.6. Tour d'atomisation ONERA, [9].	10
1.7. Injecteur et spray résultant.	11
1.8. Moteur essence injection directe, [6].	11
1.9. Objectif de réduction des émissions de CO ₂ d'après CCFA, [7].	11
1.10. Composants d'un turboréacteur, Lakshya [93].	12
1.11. Simulation d'une chambre de combustion annulaire de l'ONERA, [2].	12
1.12. Objectif de réduction des émissions de CO ₂ , [1].	12
1.13. Vulcain 2, [11].	13
1.14. Ariane 5 ECA de Arianespace.	13
1.15. Classification des injecteurs : (a) Injecteurs pressurisés, (b) Injecteurs rotatifs, (c) Injecteurs diphasiques, Lefebvre and McDonell [102].	14
2.1. Étapes lors de l'atomisation assistée d'une nappe liquide par un courant d'air, Marter-Lagrange [116].	19
2.2. Évolution de l'interface entre deux écoulements, Charru [34].	20
2.3. Couche de mélange, Raynal [146].	21
2.4. Formation des instabilités longitudinales et transverses, Hong [81].	21
2.5. Accélération d'une vague, coupe transversale de l'écoulement, Hong [81].	22
2.6. Nappe U_l faible et U_g nul, Carvalho et al. [32]	24
2.7. Modes d'oscillations, Squire [163].	24
2.8. Classification d'atomisation primaire, Mansour and Chigier [113].	24
2.9. Classification des régimes d'atomisations, Fernández [58].	25
2.10. Atomisation cellulaire de Stapper and Samuelsen [164].	25
2.11. Atomisation ligamentaire de Stapper and Samuelsen [164].	25
2.12. Classification d'atomisation secondaire, Pilch and Erdman [135].	26
2.13. Classification d'atomisation secondaire, Hsiang and Faeth [83].	28
2.14. Comparaison des spectres modélisés entre RANS, LES et DNS, Trontin [169].	29
2.15. Récapitulatif des différents formalismes utilisés pour la simulation et la modélisation de l'atomisation primaire. Représentation des échelles résolues par chaque formalisme. De haut en bas : DNS de Menard et al. [117], LES de Chesnel et al. [36] et simulation RANS de Lebas et al. [101] d'après Duret [54].	29
2.16. Schématisation de la méthode des marqueurs de front, Couderc [39].	32
2.17. Principe de la méthode VOF, Zuzio [184].	33
2.18. Principe de la méthode LS, les courbes de niveaux de la fonction ϕ désignent l'ensemble des points distants de ϕ à l'interface, Zuzio [184].	33
2.19. Jet diesel en VOF, Bianchi et al. [23].	34
2.20. DNS de jet Diesel en CLSVOF.	35
2.21. DNS de jet cisailé.	35
2.22. DNS de jet cisailé par Zuzio et al. [186].	36
2.23. DNS de nappe liquide cisailée.	37
2.24. DNS de nappe liquide cisailée par Zuzio [184].	37

2.25. DNS d'une nappe liquide cisailée par Sarthou et al. [154].	38
2.26. Simulation d'une nappe liquide cisailée par Blanchard [25].	38
2.27. Colonne liquide et instabilité de surface de Kelvin-Helmholtz d'après le modèle WAVE de Reitz and Diwakar [149].	41
2.28. Distributions spatiale des gouttes calculées pour différents instants dans le spray d'eau atomisé par le jet d'air coaxial, Gorokhovski and Saveliev [68].	43
2.29. Simulation stochastique de l'atomisation d'un jet liquide cisailé par courant gazeux : visualisation de la probabilité de présence du coeur liquide et de la transport des parcelles (population de gouttes) dans le champs de gaz résolu avec une LES, d'après Jouanguy [87].	44
2.30. Récapitulatif des différents formalismes utilisés pour la simulation et la modélisation de l'atomisation primaire. Représentation des échelles résolues par chaque formalisme. De haut en bas : DNS de Menard et al. [117], LES de Chesnel et al. [36] et simulation RANS de Lebas et al. [101], d'après Duret [54].	44
3.1. Isocontour $\phi = 0$, Δ_{DNS} (rouge), $\Delta_{LES} = 16 \Delta_{DNS}$ (noir).	48
3.2. Concept de la densité d'interface et ses possibles évolutions.	49
3.3. Fonction indicatrice ψ utilisée pour délimiter les phases séparés et dispersée	57
4.1. Profils de vitesse des fluides résultant du respect de l'équilibre des forces visqueuses, continus à l'interface mais de dérivées discontinues.	69
4.2. Répartition de la pression et des composantes de vitesses sur une cellule d'un maillage de type MAC.	70
4.3. Représentation du principe de la redistanciation : (a) Iso-contours avant advection (b) Iso-contours après advection, la propriété de fonction distance est perdue (c) Iso-contours rendus parallèles grâce à l'algorithme de redistanciation, Xavier [180], Marter-Lagrange [116]	73
4.4. Représentation de reconstructions de l'interface, Zuzio [184].	74
4.5. Calcul géométrique du flux $G_{i+\frac{1}{2},j}$ sur la face Est de la cellule. L'interface reconstruite est représentée par la ligne continue bleue la cellule, Zuzio et al. [186].	77
4.6. Représentation de la méthode Ghost-Fluid en une dimension dans le cas d'une discontinuité sur la variable, Marter-Lagrange [116]	80
4.7. Représentation de la méthode Ghost-Fluid en une dimension dans le cas d'une discontinuité sur la dérivée de la variable, Marter-Lagrange [116]	80
5.1. Inclusions de l'algorithme de détection liquide dans des outils numériques.	87
5.2. Exemple de répartition de processeurs utilisés pour la détection liquide.	88
5.3. Balises dans les cellules liquides pour quatre domaines, processeurs.	89
5.4. Affectation de l'état des sommets des cellules par une reconstruction PLIC.	89
5.5. Balises initiales, états des noeuds des cellules et sens d'inspection.	90
5.6. Inspection de la cellule n°1.	90
5.7. Inspection de la cellule n°2.	90
5.8. Inspection de la cellule n°3.	91
5.9. Balises communes par structures dans chaque processeurs.	91
5.10. Actualisation des cellules fantômes avec les balises.	92
5.11. Actualisation des balises en bord de domaine.	92
5.12. Balises uniques par structures sur l'ensemble des processeurs.	93
5.13. Balises finales.	93
5.14. Transfert des données issues de la détection vers une analyse Python.	95
5.15. Principales catégories de structures en fonction des critères β , γ et ξ	95
5.16. Décroissance des erreurs relatives en fonction des maillages.	96
5.17. États topologique du liquide.	97
5.18. Cas tests de sprays de gouttes monodisperses.	99

5.19. Nuage de gouttes polydisperses et distribution associée.	99
5.20. Courbes d'accélération pour 128^3 mailles par processeur.	102
5.21. Configuration d'étude.	103
5.22. Structures liquides présentes lors d'une atomisation ligamentaire.	104
5.23. Représentation Python des structures liquides présentes lors d'une atomisation ligamentaire.	104
6.1. Processus d'atomisation ligamentaire d'une nappe liquide planaire, Fernández [58].	110
6.2. Représentation schématique du banc d'essai SHAPE, Dejean [45].	110
6.3. Détection des structures liquides générées durant une simulation d'atomisation. . .	111
6.4. Analogie entre les types d'injecteurs, Fernández [58].	111
6.5. Schématisation de la veine d'air et du profil NACA de l'injecteur du banc SHAPE, Marter-Lagrange [116].	112
7.1. Évolution du profil de vitesse, relevé de Dejean [45], relevé de Marter-Lagrange [116] et modélisation laminaire de Polhausen.	116
7.2. Schématisation d'une nappe liquide au sein d'un domaine périodique.	117
7.3. Schématisation d'une atomisation de nappe liquide plan avec injecteur.	118
7.4. Profils de vitesses et dimensions de l'injecteur.	118
8.1. Estimation de la longueur d'onde transverse, les croix sont les relevés de Fernández [58] et les droites pointillées des interpolations.	128
8.2. Évolution de la surface liquide, cas de référence.	130
8.3. Interface lors de la phase génératrice de surface, cas de référence.	130
8.4. Interface lors de la phase réductrice de surface, cas de référence.	131
8.5. Volume total des gouttes, cas de référence.	132
8.6. Nombre total de gouttes, cas de référence.	132
8.7. Surface totale des gouttes, cas de référence.	133
8.8. Distribution du volume de gouttes par taille, cas de référence.	133
8.9. Distribution du volume de gouttes par hauteur, cas de référence.	134
8.10. Diamètre de Sauter du spray, cas de référence.	135
9.1. Évolution de la surface liquide, effet de la résolution.	139
9.2. Interface à $t^* = 0.6$, effet de la résolution.	139
9.3. Interface à $t^* = 1.0$, effet de la résolution.	140
9.4. Interface à $t^* = 2.2$, effet de la résolution.	140
9.5. Volume total des gouttes, effet de la résolution.	141
9.6. Surface totale des gouttes, effet de la résolution.	141
9.7. Distribution du volume de gouttes par hauteur, effet de la résolution.	142
9.8. Diamètre de Sauter, effet de la résolution.	143
9.9. Évolution de la surface liquide, influence de la hauteur.	144
9.10. Interface à $t^* = 1.0$, influence de la hauteur.	145
9.11. Interface à $t^* = 1.9$, influence de la hauteur.	145
9.12. Volume total des gouttes, influence de la hauteur.	146
9.13. Surface totale des gouttes, influence de la hauteur.	146
9.14. Distribution du volume de gouttes par hauteur, influence de la hauteur.	147
9.15. Diamètre de Sauter, influence de la hauteur.	148
10.1. Évolution de la surface liquide en fonction de t et t^* , variations des couples $MFR-We$.	153
10.2. Interface à $t^* = 1.1$, variations des couples $MFR-We$	153
10.3. Interface à $t^* = 1.9$, variations des couples $MFR-We$	154
10.4. Volume total des gouttes, variations des couples $MFR-We$	154
10.5. Surface totale des gouttes, variations des couples $MFR-We$	155
10.6. Diamètre moyen, variations des couples $MFR-We$	155

10.7. Diamètre de Sauter, variations des couples $MFR-We$	156
10.8. Évolution de la surface liquide en fonction de t et t^* , effet du MFR	159
10.9. Interface à $t^* = 0.9$, effet du MFR	159
10.10 Interface à $t^* = 2.0$, effet du MFR	159
10.11 Volume total des gouttes, effet du MFR	160
10.12 Surface totale des gouttes, effet du MFR	160
10.13 Diamètre de Sauter, effet du MFR	161
10.14 Évolution de la surface liquide, étude du We	163
10.15 Interface à $t^* = 1.1$, étude du We	163
10.16 Interface à $t^* = 2.0$, étude du We	163
10.17 Nombre total de gouttes, étude du We	164
10.18 Volume total des gouttes, étude du We	164
10.19 Surface totale des gouttes, étude du We	165
10.20 Diamètre Sauter, étude du We	165
10.21 Évolution des diamètres de Sauter, étude du We	166
11.1. Évolution des surfaces liquides, corrélations comportementales.	171
11.2. Évolution de la surface liquide, corrélation du We	172
11.3. Diamètre de Sauter, corrélation du We	172
11.4. Diamètres de Sauter issus des simulations, des expériences et de corrélation.	173
11.5. Modélisation d'un nuage de gouttes polydisperses par un spray monodisperse équivalent ayant comme diamètre celui de Sauter.	176
11.6. Indicateurs globaux après l'opération de réjection, temps d'équilibre.	179
11.7. Évolution des Weber après l'opération de réjection.	180
11.8. Évolution des Weber d'équilibre normalisés, pour le relevé à l'équilibre.	181
12.1. Zoom sur le développement des longueurs d'ondes de la nappe liquide.	192
12.2. Schématisation du procédé d'obtention d'une longueur d'onde.	192
12.3. Mesures de longueurs d'ondes longitudinales.	193
12.4. Détection des longueurs d'ondes longitudinales avec la moyenne associée.	193
12.5. Interface lors de la pulvérisation du liquide, cas de référence.	195
12.6. Volume liquide, cas de référence.	196
12.7. Surface liquide, cas de référence.	196
12.8. Distribution du nombre de gouttes, cas de référence.	197
12.9. Distribution du volume de gouttes, cas de référence.	197
12.10 Schématisation de la génération de paquets liquides.	198
12.11 Paquets liquides représentés durant la simulation.	198
12.12 Suivi d'une structure entre deux bases de données par approximation point particule.	199
12.13 Balises associées aux structures après la méthode de suivi.	203
12.14 Nouvelle base de données, dite ordonnée, formée par les structures reconstruites de la méthode de suivi.	203
12.15 Création d'un lien d'affiliation.	204
12.16 Actualisation de la base de données ordonnée avec les parents correspondants.	205
12.17 Catégories possibles pour les amas.	206
12.18 Actualisation de la base de données ordonnée avec les catégories correspondantes.	206
12.19 Structures liquides catégorisées durant l'atomisation d'une nappe liquide.	206
12.20 Évolution du volume de la nappe.	207
12.21 Longueurs d'ondes axiales de la nappe.	207
12.22 Vues de dessus de la nappe.	208
12.23 Volume liquide des paquet, cas de référence.	209
12.24 Surface liquide des paquet, cas de référence.	210
12.25 Volume des ligaments par paquet, cas de référence.	210
12.26 Nombre de ligaments par paquet, cas de référence.	211

12.27	Volume des gouttes par paquet, cas de référence.	212
12.28	Nombre des gouttes par paquet, cas de référence.	212
12.29	Diamètre de Sauter par paquet, cas de référence.	212
12.30	$We_{exp\ paquet}$ des gouttes sortantes du domaine, cas de référence.	215
12.31	$n_{gt\ cumule}$ par paquet, cas de référence.	215
12.32	$V_{gt\ cumule}$ par paquet, cas de référence.	216
12.33	$d_{32cumule}$ par paquet, cas de référence.	216
13.1.	Mesures de longueurs d'ondes longitudinales pour l'influence des paramètres géométriques.	223
13.2.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 9.3$, influence des paramètres géométriques.	224
13.3.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 11.9$, influence des paramètres géométriques.	224
13.4.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 14.3$, influence des paramètres géométriques.	225
13.5.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 16.7$, influence des paramètres géométriques.	225
13.6.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 19$, influence des paramètres géométriques.	225
13.7.	Volume liquide des paquet, influence des paramètres géométriques.	226
13.8.	Surface liquide des paquet, influence des paramètres géométriques.	227
13.9.	Volume des ligaments par paquet, influence des paramètres géométriques.	227
13.10	Nombre des ligaments par paquet, influence des paramètres géométriques.	228
13.11	Volume des gouttes par paquet, influence des paramètres géométriques.	228
13.12	Nombre de gouttes par paquet, influence des paramètres géométriques.	229
13.13	Diamètre de Sauter par paquet, influence des paramètres géométriques.	229
13.14	$We_{exp\ paquet}$ des gouttes sortantes du domaine, influence des paramètres géométriques.	230
13.15	$n_{gt\ cumule}$ par paquet, influence des paramètres géométriques.	230
13.16	$V_{gt\ cumule}$ par paquet, influence des paramètres géométriques.	231
13.17	$d_{32cumule}$ par paquet, influence des paramètres géométriques.	231
14.1.	Mesures du volume de la nappe débitante, influence des couples $MFR-We$	235
14.2.	Mesures de longueurs d'ondes longitudinales pour l'influence des couples $MFR-We$	235
14.3.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 11.46$, influence des couples $MFR-We$	236
14.4.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 14.32$, influence des couples $MFR-We$	236
14.5.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 17.2$, influence des couples $MFR-We$	236
14.6.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 20.0$, influence des couples $MFR-We$	237
14.7.	Interface lors de la pulvérisation du liquide à $t^* = 23.0$, influence des couples $MFR-We$	237
14.8.	Volume liquide des paquet, influence des couples $MFR-We$	238
14.9.	Surface liquide des paquet, influence des couples $MFR-We$	238
14.10	Volume des ligaments par paquet, influence des couples $MFR-We$	239
14.11	Nombre des ligaments par paquet, influence des couples $MFR-We$	239
14.12	Volume des gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$	240
14.13	Nombre de gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$	240
14.14	Diamètre de Sauter par paquet, influence des couples $MFR-We$	241
14.15	$We_{exp\ paquet}$ des gouttes sortantes du domaine, influence des couples $MFR-We$	241

14.16	n_{gt} cumule par paquet, influence des couples $MFR-We$.	242
14.17	V_{gt} cumule par paquet, influence des couples $MFR-We$.	242
14.18	d_{32} cumule par paquet, influence des couples $MFR-We$.	242
15.1.	Mesures de longueurs de nappe.	246
15.2.	Relevé des longueurs de nappes pour le cas de référence.	247
15.3.	Longueurs de rupture.	247
15.4.	Extraction d'une vue de coté de la nappe.	248
15.5.	Hauteur moyenne de la nappe en fonction de la distance à l'injecteur et du temps.	249
15.6.	Fréquence de la nappe en fonction de la distance à l'injecteur et du temps.	249
15.7.	Fréquences.	250
15.8.	Diamètre de Sauter.	251
15.9.	Évolution des taux d'atomisation par paquet en fonction de leurs temps d'équilibre.	253
15.10	Représentations des taux d'atomisation en fonction de leurs temps d'équilibre.	254
15.11	Structures non atomisées dans le domaine de calcul.	255
15.12	Relevé des $\langle We_{gt} \rangle_n$ finaux en fonction des taux d'atomisation.	256
15.13	Relevés des $\langle We_{gt} \rangle_v$ finaux en fonction des taux d'atomisation.	257
15.14	Relevés des $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$ finaux en fonction des taux d'atomisation.	258
15.15	Évolution des Weber d'équilibre en fonction des taux d'atomisation par cycle.	259
15.16	Évolution des Weber d'équilibre en fonction des taux d'atomisation par simulation.	259
15.17	Évolution des Weber d'équilibre normalisés en fonction des taux d'atomisation par simulation.	260
A.1.	Position verticale des gouttes, cas de référence.	269
A.2.	Distribution du nombre de gouttes par taille, cas de référence.	270
A.3.	Distribution du nombre de gouttes par hauteur, cas de référence.	270
A.4.	Diamètre moyen du spray, cas de référence.	271
A.5.	Position verticale des gouttes, effet de la résolution.	272
A.6.	Nombre total de gouttes, effet de la résolution.	273
A.7.	Distribution du nombre de goutte par taille, effet de la résolution.	273
A.8.	Distribution du volume de goutte par taille, effet de la résolution.	274
A.9.	Diamètre moyen, effet de la résolution.	275
A.10.	Positions verticales des gouttes, influence de la hauteur.	276
A.11.	Nombre total de gouttes, influence de la hauteur.	276
A.12.	Distribution du nombre de gouttes par taille, influence de la hauteur.	277
A.13.	Distribution du volume de gouttes par taille, influence de la hauteur.	278
A.14.	Diamètre moyen, influence de la hauteur.	278
A.15.	Positions verticales des gouttes, variations des couples $MFR-We$.	279
A.16.	Nombre total de gouttes, variations des couples $MFR-We$.	280
A.17.	Distributions du nombre de gouttes par taille, variations des couples $MFR-We$.	280
A.18.	Distributions du volume de gouttes par taille, variations des couples $MFR-We$.	281
A.19.	Distributions du volume de gouttes par hauteur, variations des couples $MFR-We$.	281
A.20.	Positions verticales des gouttes, effet du MFR .	282
A.21.	Nombre total de gouttes, effet du MFR .	282
A.22.	Distribution du nombre de gouttes par taille, effet du MFR .	283
A.23.	Distribution du volume de gouttes par taille, effet du MFR .	284
A.24.	Distribution du volume de gouttes par hauteur, effet du MFR .	284
A.25.	Diamètre moyen, effet du MFR .	285
A.26.	Positions verticales des gouttes, étude du We .	286
A.27.	Distribution du nombre de gouttes par taille, étude du We .	287
A.28.	Distribution du volume de gouttes par taille, étude du We .	287
A.29.	Distribution du volume de gouttes par hauteur, étude du We .	288
A.30.	Diamètre moyen, étude du We .	289

A.31.Évolution de la surface liquide, variations de $\hat{\rho}$.	291
A.32.Interface à $t^* = 1.1$, variations de $\hat{\rho}$.	291
A.33.Interface à $t^* = 1.9$, variations de $\hat{\rho}$.	292
A.34.Interface à $t^* = 2.4$, variations de $\hat{\rho}$.	292
A.35.Positions verticales des gouttes, variations de $\hat{\rho}$.	293
A.36.Nombre total de gouttes, variations de $\hat{\rho}$.	293
A.37.Volume total des gouttes, variations de $\hat{\rho}$.	294
A.38.Surface totale des gouttes, variations de $\hat{\rho}$.	294
A.39.Distribution du nombre de gouttes par taille, variations de $\hat{\rho}$.	295
A.40.Distribution du volume des gouttes par taille, variations de $\hat{\rho}$.	295
A.41.Distribution du volume des gouttes par hauteur, variations de $\hat{\rho}$.	296
A.42.Diamètre moyen, variations de $\hat{\rho}$.	297
A.43.Diamètre de Sauter, variations de $\hat{\rho}$.	297
B.1. Volume total des gouttes.	300
B.2. Nombre total des gouttes.	300
B.3. Diamètre de Sauter.	300
B.4. $\langle We_{gt} \rangle_n$, pour le relevé du Weber à l'équilibre.	301
B.5. $\langle We_{gt} \rangle_v$, pour le relevé du Weber à l'équilibre.	301
B.6. $\langle We_{gt} \rangle_{d_{32}}$, pour le relevé du Weber à l'équilibre.	301
C.1. Gain du nombre de gouttes par paquet, cas de référence.	304
C.2. Gain du volume de gouttes par paquet, cas de référence.	304
C.3. Gain du diamètre de Sauter de gouttes par paquet, cas de référence.	304
C.4. Répartition du volume des structures liquides par catégorie pour les paquets 2 (gauche) et 5 (droite).	306
C.5. Répartition du nombre de structures liquides par catégorie pour les paquets 2 (gauche) et 5 (droite).	307
C.6. Gain du nombre de gouttes par paquet, influence des paramètres géométriques.	308
C.7. Gain du volume de gouttes par paquet, influence des paramètres géométriques.	309
C.8. Gain du diamètre de Sauter par paquet, influence des paramètres géométriques.	309
C.9. Gain du nombre de gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$.	310
C.10. Gain du volume de gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$.	310
C.11. Gain du diamètre de Sauter de gouttes par paquet, influence des couples $MFR-We$.	311

Liste des Tableaux

5.1.	Seuils pour différencier les catégories.	95
5.2.	Propriétés des fluides et géométriques pour le cas d'essai du cube.	97
5.3.	Erreurs relatives de volume et surface pour les formes cubique et sphérique (t_{init} , t_{fin}).	97
5.4.	Résultats de l'algorithme de détection pour l'analyse des sprays de gouttes mono-disperses.	98
5.5.	Résultats de la détection liquide pour le nuage de gouttes polydisperses.	100
5.6.	Temps d'exécution d'ALGODETECT normalisé par celui de DYJEAT.	100
5.7.	Géométrie et maillage de la simulation servant de support à l'étude de scalabilité.	101
5.8.	Répartitions des processeurs employés pour l'étude de scalabilité.	101
5.9.	Nombres sans dimension.	103
5.10.	Géométrie et maillage d'étude.	103
6.1.	Conditions expérimentales de Dejean [45].	112
6.2.	Nombres sans dimension retenus des travaux Dejean [45].	113
6.3.	Conditions initiales liquide et géométrique constantes.	113
6.4.	Mesures du diamètre de Sauter en fonction des couples $MFR-We$ par Dejean [45].	113
7.1.	Paramètres géométriques fixes en configuration périodique.	117
7.2.	Paramètres géométriques fixes configuration plan.	119
8.1.	Modélisations pour la longueur d'onde axiale.	126
8.2.	Estimations de la longueur d'onde axiale.	127
8.3.	Nombres sans dimension utilisés pour le cas de référence.	128
8.4.	Conditions initiales utilisés pour le cas de référence.	128
8.5.	Domaine géométrique pour le cas de référence.	129
8.6.	Maillage utilisé pour le cas de référence.	129
8.7.	Relevés des diamètres de Sauter, cas de référence.	135
9.1.	Maillages utilisés, effet de la résolution.	138
9.2.	Relevés des diamètres de Sauter, effet de la résolution.	143
9.3.	Domaines géométriques utilisés, influence de la hauteur.	144
9.4.	Relevés des diamètres de Sauter, influence de la hauteur.	147
10.1.	Nombres sans dimension utilisés, variations des couples $MFR-We$	152
10.2.	Conditions initiales utilisées, variations des couples $MFR-We$	152
10.3.	Comparaison des diamètres moyens, variations des couples $MFR-We$	155
10.4.	Relevés des diamètres de Sauter, variations des couples $MFR-We$	156
10.5.	Nombres sans dimensions utilisé, effet du MFR	158
10.6.	Conditions initiales utilisées, effet du MFR	158
10.7.	Relevés des diamètres de Sauter, effet du MFR	161
10.8.	Nombres sans dimension utilisés, étude du We	162
10.9.	Conditions initiales utilisées, étude du We	162
10.10.	Relevés des diamètres de Sauter, étude du We	166
11.1.	Nombres sans dimension utilisés, corrélation du Weber.	171
11.2.	Recueil des temps d'équilibres.	180
11.3.	Valeurs des Weber d'équilibres normalisés.	181
11.4.	Valeurs des Weber d'équilibres en fonction des conditions initiales.	182
12.1.	Nombres sans dimension utilisés pour le cas de référence.	191

12.2. Conditions initiales utilisées pour le cas de référence.	191
12.3. Domaine géométrique utilisé pour le cas de référence.	191
12.4. Maillage utilisé pour le cas de référence.	192
12.5. Seuils employés pour l'estimation des erreurs.	202
12.6. Valeurs des seuils employés pour l'estimation des erreurs.	202
12.7. Maximum d'erreur de volume par le suivi par paquet.	209
12.8. Recueil des données par cycle pour la comparaison avec l'expérience.	217
12.9. Recueil des données de la simulation pour la comparaison avec l'expérience.	218
13.1. Domaines géométriques utilisés pour l'influence des paramètres géométriques.	222
13.2. Maillages utilisés pour l'influence des paramètres géométriques.	222
13.3. Valeur moyenne des longueurs d'ondes longitudinales pour l'influence des paramètres géométriques.	223
13.4. Recueil global des données pour la comparaison avec l'expérience, influence des paramètres géométriques.	232
14.1. Nombres sans dimension utilisés pour l'influence des couples $MFR-We$	234
14.2. Conditions initiales utilisées pour l'influence des couples $MFR-We$	234
14.3. Valeur moyenne des longueurs d'ondes longitudinales, influence des couples $MFR-We$	235
14.4. Maximum d'erreurs de volume par le suivi par paquet, influence des couples $MFR-We$	238
14.5. Recueil des données par cycle, influence des couples $MFR-We$	243
14.6. Recueil des données finales, influence des couples $MFR-We$	243
15.1. Recueil des temps d'équilibre et des temps de convection.	255
15.2. Constantes représentatives des Weber d'équilibres normalisés.	260
15.3. Valeurs des Weber d'équilibre en fonction des conditions initiales.	261
A.1. Comparaison des diamètres de moyen, cas de référence.	271
A.2. Angles d'ouvertures de spray, effet de la résolution.	272
A.3. Comparaison des diamètres moyens, effet de la résolution.	274
A.4. Angles d'ouverture de spray, influence de la hauteur.	276
A.5. Comparaison des diamètres moyens, influence de la hauteur.	278
A.6. Angles d'ouvertures de spray, variations des couples $MFR-We$	279
A.7. Angles d'ouvertures de spray, effet du MFR	282
A.8. Comparaison des diamètres moyens, effet du MFR	285
A.9. Angles d'ouvertures de spray, étude du We	286
A.10. Comparaison des diamètres moyens, étude du We	289
A.11. Nombres sans dimension utilisés, variations de $\hat{\rho}$	290
A.12. Conditions initiales utilisées, variations de $\hat{\rho}$	290
A.13. Angles d'ouvertures de spray, variations de $\hat{\rho}$	292
A.14. Comparaison des diamètres moyens, variations de $\hat{\rho}$	296
A.15. Relevés des diamètres de Sauter, variations de $\hat{\rho}$	297
B.1. Nombres sans dimension utilisés, réjection des gouttes.	299
C.1. Numérotation des paquets par ordre de détachement en fonction des cycles.	303
C.2. Volume maximal détaché pour les deux paquets analysés.	305

Nomenclature

Grandeurs géométriques ou physiques

Δ	Échelle caractéristique de la maille
L	Grande longueur caractéristique
Ω	Densité d'interface massique
Σ	Densité d'interface
U	Vecteur vitesse
a	Accélération
Cat	Categorie
C_D	Coefficient de trainée
κ	Courbure
γ	Critère basé sur l'allongement
ξ	Critère basé sur le volume
d_{10}	Diamètre moyen
d_{32}	Diamètre de Sauter
Ng	Densité volumique de gouttes
d	Diamètre caractéristique
ϵ	Épaisseur caractéristique de la lèvre séparatrice
α	Épaisseur caractéristique de la nappe liquide
δ	Épaisseur caractéristique
ϵ	Dissipation
η	Perturbation de l'interface
G	Fonction filtre
F	Force
Y	Fraction volumique
ft	Coefficient de frottement
f	Fréquence
h	Fonction Heavyside
I	Identité
kv	Vecteur d'onde
k	Énergie cinétique turbulente
λ	Longueur d'onde
l	Faible longueur caractéristique
m	Masse
μ	Viscosité dynamique
n	Nombre
nproc	Nombre de processus
np	Nombre de points
ν	Viscosité cinématique
ω	Pulsation
ϕ	Distance signée
Pos	Vecteur position
x	Coordonnée sur l'axe \vec{x}
y	Coordonnée sur l'axe \vec{y}
z	Coordonnée sur l'axe \vec{z}
P	Pression
kr	Coefficient de raideur
r	Rayon
ψ	Fonction de répartition

ρ	Densité
σ	Tension de surface
β	Critère basé sur la sphéricité
S	Surface
Tag	Balise
τ	Temps caractéristique
t	Échelle temporelle
S	Tenseur des efforts
R	Tenseur
θ	Angle
u	Composante de vitesse sur l'axe \vec{x}
V	Volume
v	Composante de vitesse sur l'axe \vec{y}
w	Composante de vitesse sur l'axe \vec{z}

Indices

ω	Vorticité
c	Critique
g	Gaz
l	Liquide
ax	Axial
$coll/coal$	Collision et coalescence
$coll$	Collision
$diss$	Dissipative
eq	Équilibre
$evap$	Évaporation
gr	Groupe
i,j,k	I, J, K
i,j	I, J
im	Imaginaire
$init$	Initial
$injecteur$	Injecteur
inj	Injection
int	Interne
i	I
j	J
$k-h$	Kelvin-Helmholtz
mel	Mélange
min	Minimale
$model$	Modèle
$r-t$	Rayleigh-Taylor
$reel$	Réelle
rel	Relative
rup	Rupture
tr	Transverse
x	X
y	Y
z	Z
$cell$	Cellule
cg	Centre de gravité
cmp	Comparaison
$conv$	Convection

<i>corr</i>	Corrélation
<i>cl</i>	Couche limite
<i>cumule</i>	Cumule
<i>cycle</i>	Cycle
<i>deb</i>	Début
<i>den</i>	Dense
<i>detect</i>	Détecte
<i>disp</i>	Dispersé
<i>dist</i>	Distance
<i>dom</i>	Domaine
<i>eff</i>	Efficace
<i>exp</i>	Experience
<i>fille</i>	Fille
<i>fin</i>	Final
<i>gt</i>	Goutte
<i>DNS</i>	DNS
<i>LES</i>	LES
<i>instab</i>	Instabilité
<i>inte</i>	Integral
<i>k</i>	Kolmogorov
<i>lig</i>	Ligament
<i>max</i>	Maximal
<i>mère</i>	Mère
<i>moy</i>	Moyenne
<i>nappe</i>	Nappe
<i>n</i>	Nombre
<i>paquet</i>	Paquet
<i>para</i>	Parallèle
<i>proc</i>	Processeur
<i>ref</i>	Référence
<i>d₃₂</i>	Diamètre de Sauter
<i>seq</i>	Séquentiel
<i>seuil</i>	Seuil
<i>simu</i>	Simulation
<i>spray</i>	Spray
<i>struc</i>	Structure
<i>s</i>	Surface
<i>tot</i>	Total
<i>turb</i>	Turbulent
<i>type</i>	Type
<i>v</i>	Volume

Nombres adimensionnels

$\hat{\mu}$	Rapport des viscosités dynamiques
$\hat{\rho}$	Rapport des densités
Kn	Nombre de Knudsen
MFR	Rapport de flux de quantité de mouvement
MR	Rapport de quantité de mouvement
Oh	Nombre d'Ohnesorge
Pr	Nombre de Prandtl
Re	Nombre de Reynolds
Sc	Nombre de Schmidt

B_T	Nombre de Spalding
We	Nombre de Weber

Opérations

$[\cdot]$	Intervalle
$(\cdot)^*$	Adimensionnalisation
(\cdot)	Filtrage LES
$(\cdot)'$	Fluctuation
(\cdot)	Moyenne de Favre
$\langle \cdot \rangle$	Moyenne
(\cdot)	Moyenne de Reynolds
$(\cdot)^T$	Transpose

Acronymes et sigles

ACLS	Accurate Conservative Level Set
CCL	Connected Component Labeling
ICL	Informed Component Labeling
AMR	Adaptative Mesh Refinement
ATEX	ATmospheres EXplosives
BASH	Bourne-Again shell
CAEP	Comité pour la Protection de l'Environnement en Aviation
CCFA	Comité de Constructeurs Français d'Automobile
CCL	Connected Component Labeling
CEDRE	Calcul des Écoulements Diphasiques Réactifs pour l'Énergétique
CLSVOF	Coupled Level Set Volum of Fluid
CLS	Conservative Level Set
CMOM	Consistent mass-momentum transport
CORIA	COmplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie
COVID	COrona Virus Disease
CPU	Central Processing Unit
DNS	Direct Numerical Simulation
DYJEAT	DYnamic JEt ATomisation
ELSA	Eulerian Lagrangian Spray Atomisation
ELVIRA	Efficient Least Squares Volume-of-Fluid Interface Reconstruction Algorithm
EPC	Étage Principal Cryotechnique
ESA	European Spatial Agency
HPC	High Performance Computing
LES	Large Eddy Simulation
LSS	Large Scale Simulation
LS	Level Set
LVIRA	Least Squares Volume-of-Fluid Interface Reconstruction Algorithm
MAC	Marker-And-Cell
MPI	Message Passing Interface
NACA	National Advisory Committee for Aeronautic
OACI	Organisation de l'Aviation Civile Internationale
ONERA	Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales
OpenFOAM	Open Field Operation and Manipulation
PLIC	Piecewise Linear Interface Calculation
RAM	Random Access Memory
RANS	Reynolds Averaged
RLSG	Refined Level Set Grid

SHAPE	SHeet And Prefilming Experiment
SLD	Supercooled Large Droplet
SLIC	Simple Linear Interface Calculation
SLOSH	Sloshing
SRI	Spectrally Refined Interface
TAB	Taylor Analogy Breakup
VOF	Volum Of Fluid
WENO	Weighted Essentially Non-Oscillatory scheme
YALES2	Yet Another Large Eddy Simulation Solver

Bibliographie

- [1] Aviation et changement climatique. https://www.ecologie.gouv.fr/sites/default/files/Aviation_et_changement_climatique.pdf.
- [2] Un nouvel outil pour la conception des chambres de combustion. <https://www.onera.fr/fr/actualites/un-nouvel-outil-pour-la-conception-des-chambres-de-combustion>.
- [3] Grotte du pech merle. <http://www.sarlat.info/decouvrir/grottes-et-sites-prehistoriques/grotte-de-pech-merle/>.
- [4] Métallurgie des poudres : explications et avantages pour l'acier de coutellerie. <https://www.eurotechni.com/fr/blog/post/la-metallurgie-des-poudres-offre-bien-des-avantages-aux-aciers-de-coutellerie>.
- [5] Aerographie sur toile. <https://spraydechezvous.wordpress.com/2018/01/14/aerographie-toile/aerographie-toile-spraydechezvous-felinsfightclub-2014/>.
- [6] Parcours du carburant d'une voiture. <https://www.avatacar.com/blog/mecanique-auto/importance-parcours-carburant-voiture/>.
- [7] Réduction des émissions de CO₂ : des progrès majeurs dans l'industrie automobile. <https://ccfa.fr/dossiers-thematiques/reduction-des-emissions-de-co2-des-progres-majeurs-dans-lindustrie-automobile/>.
- [8] Thermolaquage poudrage. <http://www.tmn-industries.fr/81-fr-thermolaquage-poudrage.html>.
- [9] Des poudres métallurgiques made in onera. <https://www.industrie-techno.com/article/des-poudres-metallurgiques-made-in-onera.28844/>, .
- [10] Atomisation (agroalimentaire). [https://fr.wikipedia.org/wiki/Atomisation_\(agroalimentaire\)](https://fr.wikipedia.org/wiki/Atomisation_(agroalimentaire)), .
- [11] Le moteur vulcain 2. http://www.capcomespace.net/dossiers/espace_europeen/ariane/ariane5/moteur_vulcain2.htm.
- [12] B. Abramzon and W.A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9) :1605–1618, September 1989. doi : 10.1016/0017-9310(89)90043-4. URL [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(89\)90043-4](https://doi.org/10.1016/0017-9310(89)90043-4).
- [13] S.V. Apte, M. Gorokhovski, and P. Moin. LES of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow*, 29(9) :1503–1522, September 2003. doi : 10.1016/s0301-9322(03)00111-3. URL [https://doi.org/10.1016/s0301-9322\(03\)00111-3](https://doi.org/10.1016/s0301-9322(03)00111-3).
- [14] E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional cartesian geometry. *Journal of Computational Physics*, 225(2) :2301–2319, August 2007. doi : 10.1016/j.jcp.2007.03.015. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.03.015>.
- [15] M. Averseng, D. Zuzio, A. Boutsikakis, and J.L. Estivalèzes. DNS simulation and analysis of periodic planar liquid sheet assisted atomization. In *10th International Conference on Multiphase Flow (ICMF 2019)*, Rio de Janeiro, Brazil, May 2019. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02195162>.

- [16] A. Bakshi, C. Altantzis, R.B. Bates, and A.F. Ghoniem. Multiphase-flow statistics using 3d detection and tracking algorithm (MS3data) : Methodology and application to large-scale fluidized beds. *Chemical Engineering Journal*, 293 :355–364, June 2016. doi : 10.1016/j.cej.2016.02.058. URL <https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.02.058>.
- [17] P.A. Beau. *Modélisation de l'atomisation d'un jet liquide - Application aux sprays diesel*. PhD thesis, Université de Rouen, 2006. Thèse de doctorat.
- [18] P.A. Beau, M. Funk, R. Lebas, and F.X. Demoulin. Applying quasi-multiphase model to simulate atomization processes in diesel engines : modeling of the slip velocity. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, April 2005. doi : 10.4271/2005-01-0220. URL <https://doi.org/10.4271/2005-01-0220>.
- [19] P.A. Beau, T. Menard, R. Lebas, A. Berlemont, S. Tanguy, and F.X. Demoulin. *Numerical jet atomization. Part II : Modeling information and comparison with DNS results*. FL Amer Soc, 2006. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00649763>.
- [20] N. Beheshti, A. Burluka, and M. Fairweather. Assessment of σ - yl_{iq} model predictions for air-assisted atomisation. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 2007.
- [21] P. Berthoumieu and G. Lavergne. Video techniques applied to the characterization of liquid sheet breakup. *Journal of Visualization*, 4(3) :267–275, September 2001. doi : 10.1007/bf03182587. URL <https://doi.org/10.1007/bf03182587>.
- [22] P. Berthoumieu, H. Carentz, P. Villedieu, and G. Lavergne. Contribution to droplet breakup analysis. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 20(5) :492–498, October 1999. doi : 10.1016/s0142-727x(99)00037-5. URL [https://doi.org/10.1016/s0142-727x\(99\)00037-5](https://doi.org/10.1016/s0142-727x(99)00037-5).
- [23] G.M. Bianchi, P. Pelloni, S. Toninel, R. Scardovelli, A. Leboissetier, and S. Zaleski. Improving the knowledge of high-speed liquid jets atomization by using quasi-direct 3d simulation. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, September 2005. doi : 10.4271/2005-24-089. URL <https://doi.org/10.4271/2005-24-089>.
- [24] G.M. Bianchi, F. Minelli, R. Scardovelli, and S. Zaleski. 3d large scale simulation of the high-speed liquid jet atomization. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, April 2007. doi : 10.4271/2007-01-0244. URL <https://doi.org/10.4271/2007-01-0244>.
- [25] G. Blanchard. *Multiscale modeling and simulation of sheared liquid sheet atomization*. Theses de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), November 2014. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-01171809>.
- [26] G. Blokkeel, B. Barbeau, and R. Borghi. A 3d eulerian model to improve the primary breakup of atomizing jet. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, March 2003. doi : 10.4271/2003-01-0005. URL <https://doi.org/10.4271/2003-01-0005>.
- [27] V. Bodoc, A. Desclaux, P. Gajan, F. Simon, and G. Illac. Characterization of confined liquid jet injected into oscillating air crossflow. *Flow, Turbulence and Combustion*, 104 (1) :1–18, July 2019. doi : 10.1007/s10494-019-00037-9. URL <https://doi.org/10.1007/s10494-019-00037-9>.
- [28] M. Boukra. *Amélioration de la pulvérisation d'un film liquide dans un injecteur aérodynamique par une excitation ultrasonique*. Thèse de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), 2011.
- [29] A.A. Burluka and R. Borghi. Stretch effect on the vaporization rate in fendell's problem. *Combustion and Flame*, 122(3) :227–232, August 2000. doi : 10.1016/s0010-2180(00)00131-0. URL [https://doi.org/10.1016/s0010-2180\(00\)00131-0](https://doi.org/10.1016/s0010-2180(00)00131-0).

- [30] S.M. Candel and T.J. Poinso. Flame stretch and the balance equation for the flame area. *Combustion Science and Technology*, 70(1-3) :1–15, March 1990. doi : 10.1080/00102209008951608. URL <https://doi.org/10.1080/00102209008951608>.
- [31] H. Carentz. *Étude de la pulverisation d'une nappe liquide mince*. PhD thesis, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), 2000. URL <http://www.theses.fr/2000PA066093>. Thèse de doctorat.
- [32] I.S. Carvalho, M.V. Heitor, and D. Santos. Liquid film disintegration regimes and proposed correlations. *International Journal of Multiphase Flow*, 28(5) :773–789, May 2002. doi : 10.1016/s0301-9322(01)00088-x. URL [https://doi.org/10.1016/s0301-9322\(01\)00088-x](https://doi.org/10.1016/s0301-9322(01)00088-x).
- [33] S.K. Chang. *Hydrodynamics of liquid jet sprays : Physicochemical analysis and computer simulation*. University of Wisconsin–Madison, 1991. URL <https://books.google.fr/books?id=szdpAAAAAAAJ>.
- [34] F. Charru. *Instabilités hydrodynamiques*. Savoirs actuels. Série Physique. EDP SCIENCES, 2007. ISBN 9782868839855. URL https://books.google.fr/books?id=QMw_WEL-fzsC.
- [35] J. Chesnel. *Large eddy simulation for atomization : application to automotive engines injection*. Theses de doctorat, Université de Rouen, June 2010. URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00604870>.
- [36] J. Chesnel, J. Reveillon, T. Menard, and F.X. Demoulin. Large eddy simulation of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, 21(9) :711–736, 2011. doi : 10.1615/atomizspr.2012003740. URL <https://doi.org/10.1615/atomizspr.2012003740>.
- [37] A.J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, 22(104) :745–762, 1968. ISSN 00255718, 10886842. URL <http://www.jstor.org/stable/2004575>.
- [38] P. Cordesse. *Contribution to the study of combustion instabilities in cryotechnic rocket engines : coupling diffuse interface models with kinetic-based moment methods for primary atomization simulations*. PhD thesis, 2020. URL <http://www.theses.fr/2020UPASC016>.
- [39] F. Couderc. *Development of a numerical code for the simulation of non-miscible fluid flow. Application to the air-assisted disintegration of a liquid jet*. Theses de doctorat, Ecole nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, February 2007. URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00143709>.
- [40] J. Cousin and C. Dumouchel. Effect of viscosity on the linear instability of a flat liquid sheet. *Atomization and Sprays*, 6(5) :563–576, 1996. doi : 10.1615/atomizspr.v6.i5.30. URL <https://doi.org/10.1615/atomizspr.v6.i5.30>.
- [41] D. A. Knaus D. A. Hebert, D. P. Schmidt. Parallel vof spray droplet identification in an unstructured grid. In *21st Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS Americas, May 2008.
- [42] D. Dai and A.Y. Tong. Analytical interface reconstruction algorithms in the PLIC-VOF method for 3d polyhedral unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 91(5) :213–227, June 2019. doi : 10.1002/flid.4750. URL <https://doi.org/10.1002/flid.4750>.
- [43] B.J. Daly. Numerical study of density-current surges. *Physics of Fluids*, 11(1) :15, 1968. doi : 10.1063/1.1691748. URL <https://doi.org/10.1063/1.1691748>.
- [44] L. Deike, W.K. Melville, and S. Popinet. Air entrainment and bubble statistics in breaking waves. *Journal of Fluid Mechanics*, 801 :91–129, 2016. doi : 10.1017/jfm.2016.372.

- [45] B. Dejean. *Experimental study of liquid sheet atomization with and without prefilming zone for its modelling - Boundary condition influence*. Theses de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), December 2015. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-01297314>.
- [46] J.M. Delhaye. Some issues related to the modeling of interfacial areas in gas-liquid flows i. the conceptual issues. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics*, 329(5) :397–410, May 2001. doi : 10.1016/s1620-7742(01)01347-2. URL [https://doi.org/10.1016/s1620-7742\(01\)01347-2](https://doi.org/10.1016/s1620-7742(01)01347-2).
- [47] A. Desclaux, S. Thuillet, D. Zuzio, J.M. Senoner, D. Sebbane, V. Bodoc, and P. Ganjan. Experimental and numerical characterization of a liquid jet injected into air cross-flow with acoustic forcing. *Flow, Turbulence and Combustion*, May 2020. doi : 10.1007/s10494-020-00126-0. URL <https://doi.org/10.1007/s10494-020-00126-0>.
- [48] O. Desjardins, V. Moureau, and H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18) : 8395–8416, September 2008. doi : 10.1016/j.jcp.2008.05.027. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.05.027>.
- [49] P.E. Dimotakis. Two-dimensional shear-layer entrainment. *AIAA Journal*, 24(11) :1791–1796, November 1986. doi : 10.2514/3.9525. URL <https://doi.org/10.2514/3.9525>.
- [50] L.H. Dorey. *Modelling of combustion, soot formation and radiative transfer coupled phenomena in gas turbine combustion chambers*. Theses de doctorat, Ecole Centrale Paris, June 2012. URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00731144>.
- [51] J. Duclos, D.Veynante, and T. Poinso. A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95(1-2) :101–117, October 1993. doi : 10.1016/0010-2180(93)90055-8. URL [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(93\)90055-8](https://doi.org/10.1016/0010-2180(93)90055-8).
- [52] C. Dumouchel. On the experimental investigation on primary atomization of liquid streams. *Experiments in Fluids*, 45(3) :371–422, June 2008. doi : 10.1007/s00348-008-0526-0. URL <https://doi.org/10.1007/s00348-008-0526-0>.
- [53] C. Dumouchel and N. Chigier. Atomization of liquid sheets. In *Recent advances in spray combustion : Spray atomization and drop burning phenomena*, pages 241–259. American Institute of Aeronautics and Astronautics, January 1996. doi : 10.2514/5.9781600866418.0241.0259. URL <https://doi.org/10.2514/5.9781600866418.0241.0259>.
- [54] B. Duret. *Simulation numérique directe des écoulements liquide-gaz avec évaporation : application à l'atomisation*. PhD thesis, 2013. URL <http://www.theses.fr/2013ISAM0031>. Thèse de doctorat dirigée par Demoulin, François-Xavier et Reveillon, Julien Physique Rouen, INSA 2013.
- [55] J. Eggers. Nonlinear dynamics and breakup of free-surface flows. *Rev. Mod. Phys.*, 69 : 865–930, Jul 1997. doi : 10.1103/RevModPhys.69.865. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.69.865>.
- [56] M.M. Elkotb. Fuel atomization for spray modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 8(1) :61–91, January 1982. doi : 10.1016/0360-1285(82)90009-0. URL [https://doi.org/10.1016/0360-1285\(82\)90009-0](https://doi.org/10.1016/0360-1285(82)90009-0).
- [57] R. P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152(2) :457–492, July 1999. doi : 10.1006/jcph.1999.6236. URL <https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6236>.

- [58] V. Gutiérrez Fernández. *Experimental study of liquid sheet disintegration in a high pressure environment*. Theses de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), 2009.
- [59] V. Gutiérrez Fernández, P. Berthoumie, and G. Lavergne. Liquid sheet disintegration at high pressure : An experimental approach. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6-7) :481–491, June 2009. doi : 10.1016/j.crme.2009.06.026. URL <https://doi.org/10.1016/j.crme.2009.06.026>.
- [60] V. Gutiérrez Fernández, G. Lavergne, and P. Berthoumieu. Dynamic primary atomization characteristics in an airblast atomizer, high pressure conditions. *Atomization and Sprays*, 21(1) :1–16, 2011. doi : 10.1615/atomizspr.v21.i1.10. URL <https://doi.org/10.1615/atomizspr.v21.i1.10>.
- [61] D. Fuster, A. Bagué, T. Boeck, . Le Moyne, A. Leboissetier, S. Popinet, P. Ray, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(6) :550–565, June 2009. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2009.02.014. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2009.02.014>.
- [62] G. H. Ganser. A rational approach to drag prediction of spherical and nonspherical particles. *Powder Technology*, 77(2) :143–152, 1993. ISSN 0032-5910. doi : [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(93\)80051-B](https://doi.org/10.1016/0032-5910(93)80051-B). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/003259109380051B>.
- [63] E. Ghahramani, M. H. Arabnejad, and R. E. Bensow. Realizability improvements to a hybrid mixture-bubble model for simulation of cavitating flows. *Computers & Fluids*, 174 : 135–143, September 2018. doi : 10.1016/j.compfluid.2018.06.025. URL <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.06.025>.
- [64] F. Gibou, R. P. Fedkiw, L.T. Cheng, and M. Kang. A second-order-accurate symmetric discretization of the poisson equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 176(1) :205–227, 2002. ISSN 0021-9991. doi : <https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6977>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999101969773>.
- [65] D. Gidaspow. *Multiphase flow and fluidization*. Elsevier, 1994. doi : 10.1016/c2009-0-21244-x. URL <https://doi.org/10.1016/c2009-0-21244-x>.
- [66] M. Gorokhovski and M. Herrmann. Modeling primary atomization. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 40(1) :343–366, January 2008. doi : 10.1146/annurev.fluid.40.111406.102200. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.40.111406.102200>.
- [67] M. Gorokhovski, J. Jouanguy, and A. Chtab. Les with stochastic simulation of primary and secondary air-blast atomization. 01 2006.
- [68] M. A. Gorokhovski and V. L. Saveliev. Analyses of kolmogorov’s model of breakup and its application into lagrangian computation of liquid sprays under air-blast atomization. *Physics of Fluids*, 15(1) :184–192, January 2003. doi : 10.1063/1.1527914. URL <https://doi.org/10.1063/1.1527914>.
- [69] S. Gottlieb and C.W. Shu. Total variation diminishing runge-kutta schemes. *Mathematics of Computation*, 67(221) :73–85, 1998. doi : 10.1090/s0025-5718-98-00913-2. URL <https://doi.org/10.1090/s0025-5718-98-00913-2>.
- [70] M. Griebel and M. Klitz. Clsvof as a fast and mass-conserving extension of the level-set method for the simulation of two-phase flow problems. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 71(1) :1–36, 2017. doi : 10.1080/10407790.2016.1244400. URL <https://doi.org/10.1080/10407790.2016.1244400>.

- [71] H. Grosshans, R.Z. Szász, and L. Fuchs. Development of an efficient statistical volumes of fluid–lagrangian particle tracking coupling method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 74(12) :898–918, February 2014. doi : 10.1002/fld.3879. URL <https://doi.org/10.1002/fld.3879>.
- [72] L. He, X. Ren, Q. Gao, X. Zhao, B. Yao, and Y. Chao. The connected-component labeling problem : A review of state-of-the-art algorithms. *Pattern Recognition*, 70 :25–43, October 2017. doi : 10.1016/j.patcog.2017.04.018. URL <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2017.04.018>.
- [73] M. Heinrich and R. Schwarze. 3d-coupling of volume-of-fluid and lagrangian particle tracking for spray atomization simulation in OpenFOAM. *SoftwareX*, 11 :100483, January 2020. doi : 10.1016/j.softx.2020.100483. URL <https://doi.org/10.1016/j.softx.2020.100483>.
- [74] H. Helmholtz. On discontinuous fluid motions. *Phil. Mag*, 36(4) :337–346, 1868.
- [75] K. Hendrickson, G. D. Weymouth, and D. K.P. Yue. Informed component label algorithm for robust identification of connected components with volume-of-fluid method. *Computers & Fluids*, 197 :104373, 2020. ISSN 0045-7930. doi : <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2019.104373>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793019303317>.
- [76] M. Herrmann. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics*, 227(4) :2674–2706, February 2008. doi : 10.1016/j.jcp.2007.11.002. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.11.002>.
- [77] M. Herrmann. Detailed numerical simulations of the primary atomization of a turbulent liquid jet in crossflow. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 132(6), March 2010. doi : 10.1115/1.4000148. URL <https://doi.org/10.1115/1.4000148>.
- [78] M. Herrmann. A parallel eulerian interface tracking/lagrangian point particle multi-scale coupling procedure. *Journal of Computational Physics*, 229(3) :745–759, 2010. doi : 10.1016/j.jcp.2009.10.009. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.10.009>.
- [79] H. Hiroyasu, M. Arai, and M. Tabata. Empirical equations for the sauter mean diameter of a diesel spray. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, February 1989. doi : 10.4271/890464. URL <https://doi.org/10.4271/890464>.
- [80] C.W Hirt and B.D Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1) :201–225, January 1981. doi : 10.1016/0021-9991(81)90145-5. URL [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5).
- [81] M. Hong. *Atomisation et mélange dans les jets coaxiaux liquide-gaz*. PhD thesis, 2003. URL <http://www.theses.fr/2003INPG0022>.
- [82] M. Hong, A. H. Cartellier, and E. J. Hopfinger. Atomisation and mixing in coaxial injection. In *4th International Conference on Launcher Technology Space Launcher Liquid Propulsion*, page 10 pages, Liège, Belgium, December 2002. Belgium CNES Publ. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00202242>.
- [83] L.P. Hsiang and G.M. Faeth. Near-limit drop deformation and secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow*, 18(5) :635–652, September 1992. doi : 10.1016/0301-9322(92)90036-g. URL [https://doi.org/10.1016/0301-9322\(92\)90036-g](https://doi.org/10.1016/0301-9322(92)90036-g).
- [84] V.A. Iyer and J. Abraham. An evaluation of a two-fluid eulerian-liquid eulerian-gas model for diesel sprays. *Journal of Fluids Engineering*, 125(4) :660–669, July 2003. doi : 10.1115/1.1593708. URL <https://doi.org/10.1115/1.1593708>.

- [85] V.A. Iyer, J. Abraham, and V. Magi. Exploring injected droplet size effects on steady liquid penetration in a diesel spray with a two-fluid model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(3) :519–531, January 2002. doi : 10.1016/s0017-9310(01)00168-5. URL [https://doi.org/10.1016/s0017-9310\(01\)00168-5](https://doi.org/10.1016/s0017-9310(01)00168-5).
- [86] S. Jay, F. Lacas, and S. Candel. Combined surface density concepts for dense spray combustion. *Combustion and Flame*, 144(3) :558–577, February 2006. doi : 10.1016/j.combustflame.2005.07.017. URL <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2005.07.017>.
- [87] J. Jouanguy. *Modélisation phénoménologique de pulvérisation de sprays couplée à une approche LES pour la phase gazeuse*. Theses, Université de Rouen, July 2007. URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00380980>.
- [88] M. Kang, R. Fedkiw, and X.D. Liu. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *Journal of Scientific Computing*, 15 :323–360, 2000.
- [89] A. Kawano. A simple volume-of-fluid reconstruction method for three-dimensional two-phase flows. *Computers & Fluids*, 134-135 :130–145, August 2016. doi : 10.1016/j.compfluid.2016.05.014. URL <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2016.05.014>.
- [90] W. Kelvin. Hydrokinetic solutions and observations. *phil. mag. series 4*. 1871.
- [91] G. Kocamustafaogullari and M. Ishii. Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(3) :481–493, February 1995. doi : 10.1016/0017-9310(94)00183-v. URL [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(94\)00183-v](https://doi.org/10.1016/0017-9310(94)00183-v).
- [92] A. N. Kolmogorov. Dissipation of energy in the locally isotropic turbulence. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences*, 434(1890) : 15–17, July 1991. doi : 10.1098/rspa.1991.0076. URL <https://doi.org/10.1098/rspa.1991.0076>.
- [93] K. A. Lakshya. Design and analysis of a high pressure ratio and high mass flow centrifugal compressor. 08 2018.
- [94] M. Lalo. *Atomisation d'un film liquide mince par action combinée des instabilités de Kelvin-Helmholtz et de Faraday : application aux injecteurs aérodynamiques des turbomachines aéronautiques*. PhD thesis, 2006. URL <http://www.theses.fr/2006ESAE0025>.
- [95] C. Larricq-Fourcade. *Étude de la pulvérisation assistée en air d'une nappe liquide et influence d'un vent ionique sur les instabilités hydrodynamiques*. Thèse de doctorat, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), 2006.
- [96] J. C. Lasheras and E. J. Hopfinger. Liquid jet instability and atomization in a coaxial gas stream. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32(1) :275–308, January 2000. doi : 10.1146/annurev.fluid.32.1.275. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.32.1.275>.
- [97] J.C. Lasheras, E. Villermaux, and E.J. Hopfinger. Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 357 :351–379, February 1998. doi : 10.1017/s0022112097008070. URL <https://doi.org/10.1017/s0022112097008070>.
- [98] B.E. Launder and D.B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3(2) :269–289, March 1974. doi : 10.1016/0045-7825(74)90029-2. URL [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(74\)90029-2](https://doi.org/10.1016/0045-7825(74)90029-2).

- [99] R. Lebas. *Modélisation eulérienne de l'atomisation haute pression. Influences sur la vaporisation et la combustion induite*. PhD thesis, 2007. URL <http://www.theses.fr/2007ROUES047>. Thèse de doctorat dirigée par Demoulin, François-Xavier et Gorokhovski, Mikhael Physique. Energétique Rouen 2007.
- [100] R. Lebas, G. Blokkeel, P.A. Beau, and F.X. Demoulin. Coupling vaporization model with the eulerian-lagrangian spray atomization (ELSA) model in diesel engine conditions. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, April 2005. doi : 10.4271/2005-01-0213. URL <https://doi.org/10.4271/2005-01-0213>.
- [101] R. Lebas, T. Menard, P.A. Beau, A. Berlemont, and F.X. Demoulin. Numerical simulation of primary break-up and atomization : DNS and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3) :247–260, March 2009. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2008.11.005. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2008.11.005>.
- [102] A. H. Lefebvre and V. G. McDonell. *Atomization and Sprays*. CRC Press, March 2017. doi : 10.1201/9781315120911. URL <https://doi.org/10.1201/9781315120911>.
- [103] X. Li and M. C. Soteriou. High fidelity simulation and analysis of liquid jet atomization in a gaseous crossflow at intermediate weber numbers. *Physics of Fluids*, 28(8) :082101, August 2016. doi : 10.1063/1.4959290. URL <https://doi.org/10.1063/1.4959290>.
- [104] A. Lidtke, S. Turnock, and V. Humphrey. Multi-scale modelling of cavitation-induced pressure around the delft twist 11 hydrofoil. 01 2016.
- [105] J. Lopez and J. Hernández. Analytical and geometrical tools for 3d volume of fluid methods in general grids. *Journal of Computational Physics*, 227 :5939–5948, 06 2008. doi : 10.1016/j.jcp.2008.03.010.
- [106] A. Lozano, C.J. Call, C. Dopazo, and A. Garcia-Olivares. Experimental and numerical study of the atomization of a planar liquid sheet. *Atomization and Sprays*, 6(1) :77–94, 1996. doi : 10.1615/atomizspr.v6.i1.40. URL <https://doi.org/10.1615/atomizspr.v6.i1.40>.
- [107] A. Lozano, F. Barreras, G. Hauke, and C. Dopazo. Longitudinal instabilities in an air-blasted liquid sheet. *Journal of Fluid Mechanics*, 437 :143–173, June 2001. doi : 10.1017/s0022112001004268. URL <https://doi.org/10.1017/s0022112001004268>.
- [108] A. Lozano, F. Barreras, C. Siegler, and D. Löw. The effects of sheet thickness on the oscillation of an air-blasted liquid sheet. *Experiments in Fluids*, 39(1) :127–139, June 2005. doi : 10.1007/s00348-005-0989-1. URL <https://doi.org/10.1007/s00348-005-0989-1>.
- [109] A. Lozano, E. Calvo, J. A. García, and F. Barreras. Mode transitions in an oscillating liquid sheet. *Physics of Fluids*, 23(4) :044103, April 2011. doi : 10.1063/1.3580289. URL <https://doi.org/10.1063/1.3580289>.
- [110] M. De Luca, A. Vallet, and R. Borghi. Contribution à la modélisation de la pulvérisation d'un liquide phytosanitaire en vue de réduire les pollutions. In *Journées Interdisciplinaires sur la Qualité de l'Air*, page 10 p., Villeneuve d'Ascq, France, January 2007. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00468533>.
- [111] P. C. Ma, L. Esclape, S. Carbajal, M. Ihme, T. Buschhagen, S. V. Naik, J. P. Gore, and R. P. Lucht. High-fidelity simulations of fuel injection and atomization of a hybrid air-blast atomizer. In *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, January 2016. doi : 10.2514/6.2016-1393. URL <https://doi.org/10.2514/6.2016-1393>.
- [112] A. Mansour and N. Chigier. Disintegration of liquid sheets. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 2(5) :706–719, May 1990. doi : 10.1063/1.857724. URL <https://doi.org/10.1063/1.857724>.

- [113] A. Mansour and N. Chigier. Dynamic behavior of liquid sheets. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3(12) :2971–2980, December 1991. doi : 10.1063/1.857839. URL <https://doi.org/10.1063/1.857839>.
- [114] F.E. Marble and J.E. Broadwell. The coherent flame model for turbulent chemical reactions. final report 1 mar 75–31 jan 77. 1 1977.
- [115] P. Marmottant and E. Villermaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, 498 :73–111, January 2004. doi : 10.1017/s0022112003006529. URL <https://doi.org/10.1017/s0022112003006529>.
- [116] I. Marter-Lagrange. *Méthode d'interface immergée pour la simulation directe de l'atomisation primaire*. PhD thesis, 2017. URL <http://www.theses.fr/2017ESAE0040>. Thèse de doctorat dirigée par Estivalèzes, Jean-Luc et Zuzio, Davide Energétique et transferts Toulouse, ISAE 2017.
- [117] T. Menard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/VOF/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5) :510–524, May 2007. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2006.11.001. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2006.11.001>.
- [118] C. Morel. On the surface equations in two-phase flows and reacting single-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(10) :1045–1073, October 2007. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.02.008. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.02.008>.
- [119] C. Morel, N. Goreaud, and J.-M. Delhaye. The local volumetric interfacial area transport equation : derivation and physical significance. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(6-7) :1099–1128, September 1999. doi : 10.1016/s0301-9322(99)00040-3. URL [https://doi.org/10.1016/s0301-9322\(99\)00040-3](https://doi.org/10.1016/s0301-9322(99)00040-3).
- [120] T. Ménard. *Développement d'une méthode Level Set pour le suivi d'interface. Application de la rupture de jet liquide*. PhD thesis, 2007. URL <http://www.theses.fr/2007ROUES073>. Thèse de doctorat dirigée par Berlemont, Alain Physique. Énergétique Rouen 2007.
- [121] T. Ménard, S. Tanguy, P.A. Beau, F.X. Demoulin, and A. Berlemont. *Numerical jet atomization : Part I : DNS simulation of primary break-up*. Fluids Engn Div, 2006. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00649765>.
- [122] W. Ning, R. D. Reitz, A. Lippert, and R. D. Powertrain. Development of a next-generation spray and atomization model using an eulerian-lagrangian methodology. 2007.
- [123] W. F. Noh and P. Woodward. SLIC (simple line interface calculation). In *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28 – July 2, 1976 Twente University, Enschede*, pages 330–340. Springer Berlin Heidelberg, 1976. doi : 10.1007/3-540-08004-x_336. URL https://doi.org/10.1007/3-540-08004-x_336.
- [124] E. Norde, J.M. Senoner, E. T. A. Van Der Weide, P. Trontin, H. W. M. Hoeijmakers, and P. Villedieu. Eulerian and lagrangian ice crystal trajectory simulations in a generic turbofan compressor. *Journal of Propulsion and Power*, pages 1–15, October 2018. doi : 10.2514/1.B36916. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02055824>.
- [125] G. Nykteri, P. Koukouvinis, S. R. G. Avila, C.D. Ohl, and M. Gavaises. A σ - \mathcal{Y} two-fluid model with dynamic local topology detection : Application to high-speed droplet impact. *Journal of Computational Physics*, 408 :109225, May 2020. doi : 10.1016/j.jcp.2019.109225. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.109225>.

- [126] N. Odier, G. Balarac, C. Corre, and V. Moureau. Numerical study of a flapping liquid sheet sheared by a high-speed stream. *International Journal of Multiphase Flow*, 77 :196–208, December 2015. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2015.08.001. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2015.08.001>.
- [127] P.J. O’Rourke. Collective drop effects on vaporizing liquid sprays. 11 1981.
- [128] P.J. O’Rourke and A.A. Amsden. The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, November 1987. doi : 10.4271/872089. URL <https://doi.org/10.4271/872089>.
- [129] P.J. O’Rourke and F.V. Bracco. Modelling of drop interactions in thick sprays and a comparison with experiments. *The institution of mechanical engineers*, 1980.
- [130] S. Osher and R. Fedkiw. *Level Set methods and dynamic implicit surfaces*. Springer New York, 2003. doi : 10.1007/b98879. URL <https://doi.org/10.1007/b98879>.
- [131] M. Pai, H. Pitsch, and O. Desjardins. Detailed numerical simulations of primary atomization of liquid jets in crossflow. American Institute of Aeronautics and Astronautics, January 2009. doi : 10.2514/6.2009-373. URL <https://doi.org/10.2514/6.2009-373>.
- [132] J. Park, K.Y. Huh, X. Li, and M. Renksizbulut. Experimental investigation on cellular breakup of a planar liquid sheet from an air-blast nozzle. *Physics of Fluids*, 16(3) :625–632, March 2004. doi : 10.1063/1.1644575. URL <https://doi.org/10.1063/1.1644575>.
- [133] M. A. Patterson and R. D. Reitz. Modeling the effects of fuel spray characteristics on diesel engine combustion and emission. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, February 1998. doi : 10.4271/980131. URL <https://doi.org/10.4271/980131>.
- [134] P. Pepiot and O. Desjardins. Numerical analysis of the dynamics of two- and three-dimensional fluidized bed reactors using an euler-lagrange approach. *Powder Technology*, 220 :104–121, April 2012. doi : 10.1016/j.powtec.2011.09.021. URL <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2011.09.021>.
- [135] M. Pilch and C.A. Erdman. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International Journal of Multiphase Flow*, 13(6) :741–757, November 1987. doi : 10.1016/0301-9322(87)90063-2. URL [https://doi.org/10.1016/0301-9322\(87\)90063-2](https://doi.org/10.1016/0301-9322(87)90063-2).
- [136] J. E. Pilliod and E. G. Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, 199(2) :465–502, September 2004. doi : 10.1016/j.jcp.2003.12.023. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.12.023>.
- [137] J.P. Plateau. Recherches expérimentales et théorique sur les figures d’équilibre d’une masse liquide sans pesanteur. *Mémoires de l’Académie Royale des Sciences, des Lettres et des Beaux-Arts de Belgique*, 23 :1, 1849. URL <http://eudml.org/doc/178992>.
- [138] S.B. Pope. The evolution of surfaces in turbulence. *International Journal of Engineering Science*, 26(5) :445–469, January 1988. doi : 10.1016/0020-7225(88)90004-3. URL [https://doi.org/10.1016/0020-7225\(88\)90004-3](https://doi.org/10.1016/0020-7225(88)90004-3).
- [139] T. Pringuey. *Large eddy simulation of primary liquid-sheet breakup*. PhD thesis, 11 2012.
- [140] E. G. Puckett, A. S. Almgren, J. B. Bell, D. L. Marcus, and W. J. Rider. A high-order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 130(2) :269–282, January 1997. doi : 10.1006/jcph.1996.5590. URL <https://doi.org/10.1006/jcph.1996.5590>.

- [141] E.G. Puckett and J.S. Saltzman. A 3d adaptive mesh refinement algorithm for multimaterial gas dynamics. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 60(1-4) :84–93, November 1992. doi : 10.1016/0167-2789(92)90228-f. URL [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(92\)90228-f](https://doi.org/10.1016/0167-2789(92)90228-f).
- [142] J. Qian and C.K. Law. Regimes of coalescence and separation in droplet collision. *Journal of Fluid Mechanics*, 331 :59–80, January 1997. doi : 10.1017/s0022112096003722. URL <https://doi.org/10.1017/s0022112096003722>.
- [143] M. Raessi and H. Pitsch. Consistent mass and momentum transport for simulating incompressible interfacial flows with large density ratios using the level set method. *Computers & Fluids*, 63 :70–81, June 2012. doi : 10.1016/j.compfluid.2012.04.002. URL <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.04.002>.
- [144] F. Ben Rayana. *Contribution à l'étude des instabilités interfaciales liquide-gaz en atomisation assistée et taille de gouttes*. PhD thesis, 2007. URL <http://www.theses.fr/2007INPG0048>. Thèse de doctorat.
- [145] L. Rayleigh. On the stability, or instability, of certain fluid motions. *Proc. London Math. Soc.*, 9 :57–70, 1880.
- [146] L. Raynal. *Instabilité et entrainement à l'interface d'une couche de mélange liquide-gaz*. PhD thesis, 1997. URL <http://www.theses.fr/1997GRE10222>.
- [147] R. D. Reitz. *Atomization and other breakup regimes of a liquid jet*. PhD thesis, Princeton Univ., NJ., January 1978.
- [148] R. D. Reitz. Mechanism of atomization of a liquid jet. *Physics of Fluids*, 25(10) :1730, 1982. doi : 10.1063/1.863650. URL <https://doi.org/10.1063/1.863650>.
- [149] R. D. Reitz and R. Diwakar. Structure of high-pressure fuel sprays. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, February 1987. doi : 10.4271/870598. URL <https://doi.org/10.4271/870598>.
- [150] R. D. Reitz and C. S. Lee. Effect of liquid properties on the breakup mechanism of high-speed liquid drops. *Atomization and Sprays*, 11(1) :1–19, 2001. doi : 10.1615/atomizspr.v11.i1.10. URL <https://doi.org/10.1615/atomizspr.v11.i1.10>.
- [151] J.C. Romero. Pedro paulet : Peruvian pioneer of the space age. In *SpaceOps 2010 Conference*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, April 2010. doi : 10.2514/6.2010-2217. URL <https://doi.org/10.2514/6.2010-2217>.
- [152] K. A. Sallam, C. Aalburg, and G. M. Faeth. Breakup of round non turbulent liquid jets in gaseous crossflow. *AIAA Journal*, 42(12) :2529–2540, December 2004. doi : 10.2514/1.3749. URL <https://doi.org/10.2514/1.3749>.
- [153] H. Samet and M. Tamminen. Efficient component labeling of images of arbitrary dimension represented by linear bintrees. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, 10 :579–586, 1988.
- [154] A. Sarthou, D. Zuzio, and J.L.c Estivalèzes. Multiscale eulerian-lagrangian method for parallel simulation of atomization induced by air-blast planar injectors. In *21st AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, June 2013. doi : 10.2514/6.2013-2596. URL <https://doi.org/10.2514/6.2013-2596>.
- [155] F. Savart. Memoire sur la constitution des veines liquides lancees par des orifices circulaires en mince paroi. *Ann. de chim.*, 53 :337–386, 1833.
- [156] F. Savart. Mémoire sur le choc de deux veines liquides animées de mouvements directement opposés. *Ann. Chim. Phys*, 54 :257–310, 1833.

- [157] F. Savart. Mémoire sur le choc d'une veine liquide lancée contre un plan circulaire. *Ann. chim.*, 54(56) :1833, 1833.
- [158] J. Shinjo and A. Umemura. Simulation of liquid jet primary breakup : Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7) :513–532, July 2010. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2010.03.008. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2010.03.008>.
- [159] C.W. Shu. *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*, pages 325–432. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1998. ISBN 978-3-540-49804-9. doi : 10.1007/BFb0096355. URL <https://doi.org/10.1007/BFb0096355>.
- [160] M.S. Sidhu and A.A. Burluka. Average vaporisation rate in turbulent subcritical two-phase flow. *Combustion Science and Technology*, 180(5) :975–996, April 2008. doi : 10.1080/00102200801893796. URL <https://doi.org/10.1080/00102200801893796>.
- [161] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, 91(3) :99–164, March 1963. doi : 10.1175/1520-0493(1963)091<0099:gcewtp>2.3.co;2. URL [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1963\)091<0099:gcewtp>2.3.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(1963)091<0099:gcewtp>2.3.co;2).
- [162] A. Spitzengerger, S. Neumann, M. Heinrich, and R. Schwarze. Particle detection in VOF-simulations with OpenFOAM. *SoftwareX*, 11 :100382, January 2020. doi : 10.1016/j.softx.2019.100382. URL <https://doi.org/10.1016/j.softx.2019.100382>.
- [163] H.B. Squire. Investigation of the instability of a moving liquid film. *British Journal of Applied Physics*, 4(6) :167–169, jun 1953. doi : 10.1088/0508-3443/4/6/302. URL <https://doi.org/10.1088/0508-3443/4/6/302>.
- [164] B.E. Stapper and G.S. Samuelsen. *An experimental study of the breakup of a two-dimensional liquid sheet in the presence of co-flow air shear*. AIAA-90/0461. AIAA, 1990. URL <https://books.google.fr/books?id=UcIfyAEACAAJ>.
- [165] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3) :506–517, September 1968. doi : 10.1137/0705041. URL <https://doi.org/10.1137/0705041>.
- [166] M. Sussman and E. G. Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :301–337, August 2000. doi : 10.1006/jcph.2000.6537. URL <https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6537>.
- [167] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1) :146–159, 1994. ISSN 0021-9991. doi : <https://doi.org/10.1006/jcph.1994.1155>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184711557>.
- [168] R. Temam. Approximation d'équations aux dérivées partielles par des méthodes de décomposition. *Séminaire Bourbaki*, 12 :295–303, 1969-1970. URL <http://eudml.org/doc/109784>.
- [169] P. Trontin. *A large eddy simulation (LES) approach for multiphase interfacial flows. Application for primary atomization*. Theses de doctorat, Ecole nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, November 2009. URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00499373>.

- [170] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :708–759, May 2001. doi : 10.1006/jcph.2001.6726. URL <https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6726>.
- [171] M. H. Uddin, M. Arafat H. Khan, and C. J. Coronella. 3-d face-masking detection and tracking algorithm for bubble dynamics : Method and validation for gas-solid fluidized beds. *Powder Technology*, 313 :88–98, May 2017. doi : 10.1016/j.powtec.2017.02.034. URL <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.02.034>.
- [172] A. Vallet. *Contribution à la modélisation de l'atomisation d'un jet liquide haute pression*. Theses de doctorat, 1997.
- [173] A. Vallet, A.A. Burluka, and R. Borghi. Development of a eulerian model for the atomization of a liquid jet. *Atomization and Sprays*, 11(6) :24, 2001. doi : 10.1615/atomizspr.v11.i6.20. URL <https://doi.org/10.1615/atomizspr.v11.i6.20>.
- [174] C. M. Varga, J. C. Lasheras, and E. J. Hopfinger. Initial breakup of a small-diameter liquid jet by a high-speed gas stream. *Journal of Fluid Mechanics*, 497 :405–434, December 2003. doi : 10.1017/s0022112003006724. URL <https://doi.org/10.1017/s0022112003006724>.
- [175] G. Vaudor, T. Ménard, W. Aniszewski, and A. Berlemont. A consistent mass and momentum flux computation method for two phase flows. Application to atomization process. *Computers & Fluids*, 152 :204–216, 2017. doi : 10.1016/j.compfluid.2017.04.023. URL <https://hal.sorbonne-universite.fr/hal-01525891>.
- [176] P. Villedieu, P. Trontin, and R. Chauvin. Glaciated and mixed phase ice accretion modeling using ONERA 2d icing suite. American Institute of Aeronautics and Astronautics, June 2014. doi : 10.2514/6.2014-2199. URL <https://doi.org/10.2514/6.2014-2199>.
- [177] Y. Wan and N. Peters. Scaling of spray penetration with evaporation. *Atomization and Sprays*, 9(2) :111–132, 1999. doi : 10.1615/atomizspr.v9.i2.10. URL <https://doi.org/10.1615/atomizspr.v9.i2.10>.
- [178] Z. Wang, J. Yang, and F. Stern. High-fidelity simulations of bubble, droplet and spray formation in breaking waves. *Journal of Fluid Mechanics*, 792 :307–327, 2016. doi : 10.1017/jfm.2016.87.
- [179] F. Whittle. The first james clayton lecture : The early history of the whittle jet propulsion gas turbine. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 152(1) :419–435, June 1945. doi : 10.1243/pime_proc_1945_152_071_02. URL https://doi.org/10.1243/pime_proc_1945_152_071_02.
- [180] T. Xavier. *Simulation numérique directe de l'impact de SLD (Supercooled Large Droplet) sur une paroi*. Theses, UNIVERSITE DE TOULOUSE, February 2020. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-02890265>.
- [181] T. Xavier, D. Zuzio, M. Averseng, and J.L. Estivalèzes. Toward direct numerical simulation of high speed droplet impact. *Meccanica*, 55(2) :387–401, May 2019. doi : 10.1007/s11012-019-00980-x. URL <https://doi.org/10.1007/s11012-019-00980-x>.
- [182] D. Youngs. Numerical methods for fluid dynamics. *Academic Press*, 01 1982.
- [183] H. Yu, L. Goldsworthy, M. Ghiji, P.A. Brandner, and V. Garaniya. A parallel volume of fluid-lagrangian parcel tracking coupling procedure for diesel spray modelling. *Computers & Fluids*, 150 :46–65, 2017. ISSN 0045-7930. doi : <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2017.03.027>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793017301081>.

-
- [184] D. Zuzio. *Direct numerical simulation of two phase flows with adaptive mesh refinement*. Theses, Ecole nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, December 2010. URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00630136>.
- [185] D. Zuzio, J.L. Estivalèzes, and B. DiPierro. An improved multiscale eulerian–lagrangian method for simulation of atomization process. *Computers & Fluids*, 176 :285–301, November 2018. doi : 10.1016/j.compfluid.2016.12.018. URL <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2016.12.018>.
- [186] D. Zuzio, A. Orazzo, J.L. Estivalèzes, and I. Lagrange. A new efficient momentum preserving level-set/VOF method for high density and momentum ratio incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 410 :109342, June 2020. doi : 10.1016/j.jcp.2020.109342. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109342>.

Résumé

L'optimisation du processus de combustion nécessite une fine connaissance du processus d'atomisation qui se déroule dans les chambres de combustions. Ce dernier résulte du cisaillement du carburant (injecté sous forme de jet ou de nappe) par un fort écoulement d'air environnant. La simulation aux grandes échelles (LES) est devenue un outil privilégiée pour la simulation instationnaire des foyers. Cependant, cette méthode n'est pas adaptée à la capture des petites échelles diphasiques apparaissant lors de l'atomisation assistée. Des modèles sous-maille fournissant ces informations deviennent donc nécessaires. Ces modèles étant à ce jour peu traités en littérature, ce travail de thèse se propose de contribuer au développement de modèles LES pour l'atomisation assistée, plus en particulier à la famille de méthodes dites "à densité d'interface". Pour ce faire, une approche DNS a été choisie pour simuler, comprendre et quantifier l'atomisation assistée sur des configurations simplifiées mais pertinentes.

Deux configurations ont été investiguées pour leurs avantages complémentaires. La première, dite nappe "périodique", repose sur de fortes hypothèses mais reproduit les principaux mécanismes de l'atomisation, en étant bien moins coûteuse en maillages et temps CPU. Cette configuration est idéale pour des études paramétriques. La seconde, dite nappe "réaliste" (spatiale), est plus coûteuse mais reproduit fidèlement le banc expérimental SHAPE de l'ONERA. Cette dernière permet de simuler la sortie complète du liquide de l'injecteur jusqu'à son atomisation, permettant une comparaison avec la base de données expérimentale de l'ONERA. En parallèle, un algorithme de détection fut construit pour identifier et recueillir les propriétés topologiques de chacune des structures liquide générées dans ces simulations. Cela, permet de classer ces structures en catégories (gouttes, ligaments, autres, etc) et d'estimer plus précisément les paramètres fondamentaux d'un modèle d'atomisation sous maille de densité d'interface. Des propositions de grandeurs propres à la modélisation, telles que le temps et le nombre de Weber caractéristiques, ont été construites à partir des résultats des nappes périodiques et validées sur les nappes spatiales, cas plus réaliste et applicatif, confirmant la pertinence de la démarche choisie.

Mots clés : Atomisation assistée, Simulation numérique directe d'écoulement diphasique, Algorithme de détection liquide, Modélisation, Densité d'interface

Abstract

The optimization of the combustion process requires a detailed knowledge of the atomization process that occurs in the combustion chambers. The latter results from the shearing of the fuel by a strong surrounding air flow. Large scale simulation (LSS) has become a preferred tool for unsteady combustion simulation. However, this method is not suitable for resolving the smallest two-phase scales that occur during assisted atomization. Submesh models providing this information become necessary. As these models are not or rarely covered in the literature, this thesis aims at contributing to the development of models for assisted atomization, in particular to the family of so-called "interface density" methods. To do so, a DNS approach has been chosen to simulate assisted atomization on simplified but relevant configurations.

Two configurations have been investigated for their complementary advantages. The first one, cited as "periodic" sheet, is based on strong assumptions but reproduces the main mechanisms of atomization, while being much less expensive in mesh size and computational time. This configuration is ideal for parametric studies. The second configuration, cited as "realistic" sheet, is more expensive but faithfully reproduces the experimental bench SHAPE at the ONERA. The latter allows to simulate the complete exit of the liquid from the injector until its atomization, allowing a comparison with the experimental database of ONERA.

In the same time, a detection algorithm was built to identify and gather the topological properties of each liquid structure generated in these simulations. This allows to classify these structures into categories (drops, ligaments, others, etc.) and to estimate more precisely the fundamental parameters of the interface density model.

Proposals for model-specific quantities, such as the time and the characteristic Weber number, were constructed from the results of the periodic sheets and validated on the spatial sheets, a more realistic and applicable case, confirming the relevance of the chosen approach.

Key words : Air-blasted atomization, Two-phase flows, Direct numerical simulation, Liquid detect algorithm, Modelling, Interfacial density
