



**HAL**  
open science

# Modélisation de l'atomisation primaire d'oxygène liquide dans les flammes diphasiques des moteurs fusées à ergols liquides

Florian Granger

## ► To cite this version:

Florian Granger. Modélisation de l'atomisation primaire d'oxygène liquide dans les flammes diphasiques des moteurs fusées à ergols liquides. Sciences de l'ingénieur [physics]. Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE), 2023. Français. NNT : 2023ESAE0068 . tel-04814504

**HAL Id: tel-04814504**

**<https://hal.science/tel-04814504v1>**

Submitted on 2 Dec 2024

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

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



# THÈSE

En vue de l'obtention du

**DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE**

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

---

---

Présentée et soutenue le 11 décembre 2023 par :

**Florian GRANGER**

**Modélisation de l'atomisation primaire d'oxygène liquide dans les  
flammes diphasiques des moteurs fusées à ergols liquides**

---

---

## JURY

STÉPHANE ZALESKI	Professeur des Universités	Président
FRANÇOIS-XAVIER DEMOULIN	Professeur des Universités	Rapporteur
JEAN-PHILIPPE MATAS	Professeur des Universités	Rapporteur
ANNAFEDERICA URBANO	Maitresse de conférence	Examinatrice
JEAN-LUC ESTIVALEZES	Directeur de recherche	Directeur de thèse
LUC-HENRY DOREY	Docteur-Ingénieur	Co-directeur de thèse
DAVIDE ZUZIO	Docteur-Ingénieur	Co-encadrant (invité)
MARIE THERON	Docteur-Ingénieur	Co-encadrante (invitée)

---

**École doctorale et spécialité :**

*MEGEP : Dynamique des fluides*

**Unité de Recherche :**

*ONERA – DMPE/MPF*

**Directeur(s) de Thèse :**

*Jean Luc ESTIVALEZES, Luc-Henry DOREY*

**Rapporteurs :**

*François-Xavier DEMOULIN et Jean-Philippe MATAS*

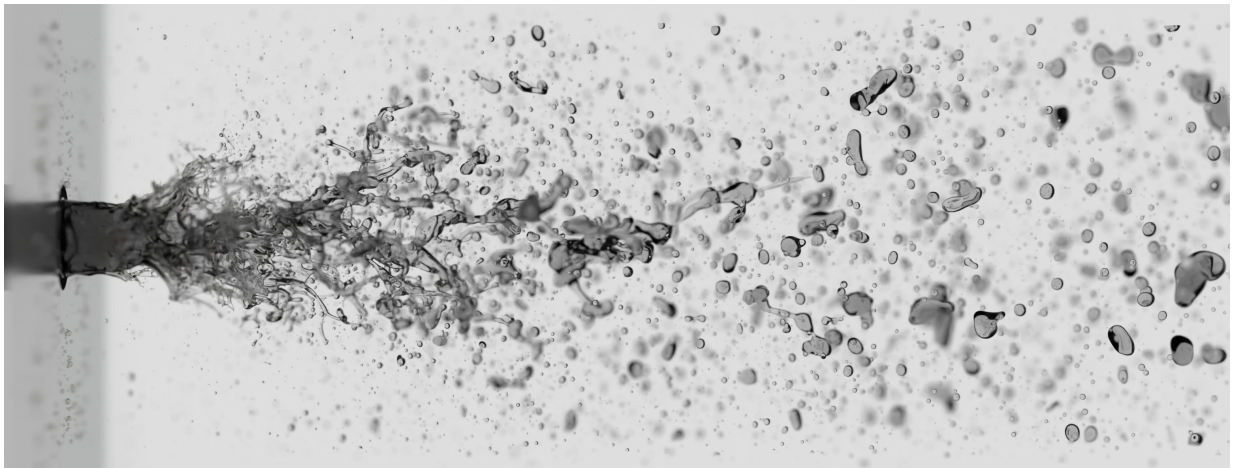


ONERA, site de Palaiseau  
6 Chem. de la Vauve aux Granges  
91120, Palaiseau

Manuscrit de thèse

# Modélisation de l'atomisation primaire d'oxygène liquide dans les flammes diphases des moteurs fusées à ergols liquides

Florian Granger



supervisé par :

Jean-Luc ESTIVALÈZES, ONERA (Directeur de thèse)  
Luc-Henry DOREY, ONERA (Co-directeur de thèse)  
Davide ZUZIO, ONERA (encadrant)  
Marie THERON, CNES (encadrante)

3 mars 2024





---

## Remerciements

Avant tout, je tiens à remercier François-Xavier Demoulins et Jean-Philippe Matas pour avoir accepté d'être rapporteurs de mes travaux de thèse, synthétisés dans ce manuscrit. Merci à Anafederica Urbano pour avoir pris part au jury de ma thèse, ainsi qu'à Stéphane Zaleski pour en avoir assuré la présidence.

Merci Jean-Luc pour ta direction, tu m'as permis de toujours garder l'équilibre entre le cap de la thèse et l'exploration du sujet sous d'autres angles plus exotiques (ça passe très vite trois ans...). Le sujet est tellement riche qu'il est facile de se perdre à essayer des choses! Merci évidemment à toi aussi Davide pour ton accompagnement sans faille durant ces trois années, même dans les moments les plus difficiles. Malgré la distance, j'ai beaucoup apprécié nos échanges lors de l'élaboration du modèle, ou encore sur les mesures de nombre de Weber sur des simulations qui ont su attiser ma curiosité tout au long de la thèse. Merci Marie pour ta supervision, tu m'as transmis l'addiction aux moteurs fusées, mais en même temps c'est facile quand on parle à des gens passionnés!

Merci JC pour ces trois belles années, tu sais tout ce que l'on a accompli pour aboutir à l'ensemble des travaux de ton post-doc et à ceux présentés dans ce manuscrit. Quel plaisir de débayer des sub-arrays MPI jusqu'à tard le soir, de faire du reverse-engineering avec hexdump pour écrire des sorties Ensignt parallèles, de coder des scripts d'interpolation et de moyenne azimutale qui bombardent sur des milliers de cœurs CPU, et j'en passe... Nous avons formé fièrement le duo le plus geek de l'ONERA et j'ai l'impression que ça a bien fonctionné!

Merci à l'ensemble des personnes de l'ONERA qui m'ont aidé que ce soit pour répondre à mes questions théoriques ou bien pour coder mes routines dans CEDRE, je pense à Lionel, Philippe, Clément et Nicolas. Je ne peux évidemment pas oublier de remercier mes collègues du PGG Magda et Robin. Ce fut un beau projet couplant tous nos savoir-faire et j'espère que cela mènera à de belles choses dans le futur.

Pour finir, merci à tous les doctorants qui ont contribué à rendre ces trois années très agréables. Le fameux couloir des doctorants avec son ambiance inégalable, des lèves-tôt à ceux qui arrivent "plus tard" merci pour cet esprit de camaraderie!



---

## Résumé

Les futurs moteurs-fusées des lanceurs européens sont développés avec l'objectif d'augmenter leur fiabilité et de diminuer leur coût. Pour cela, il est nécessaire de mieux comprendre les phénomènes physiques complexes qui régissent leur fonctionnement, pour estimer au mieux les marges de conception qui conditionnent le coût et la fiabilité du moteur. Dans le cas des moteurs-fusées à ergols liquides, les phénomènes d'instabilités de combustion de haute fréquence est particulièrement complexe et critique pour le fonctionnement du moteur. En collaboration avec le CNES, des travaux de recherche sur ce phénomène sont menés à l'ONERA pour des conditions d'injection sub-critique. Dans ce cas, l'oxygène est injecté sous forme liquide dans la chambre de combustion et subit une succession de phénomènes : atomisation du jet dense, fragmentation des ligaments liquides, évaporation des gouttelettes, combustion turbulente. Ces phénomènes doivent être restitués avec précision par la simulation afin de mieux comprendre leur rôle dans le déclenchement des instabilités de combustion qui résultent d'un couplage fort entre tous ces phénomènes. Un effort particulier est porté sur la description de l'écoulement diphasique qui implique de forts gradients de densité et une large gamme d'échelles caractéristiques. L'ONERA a développé dans le code CEDRE une stratégie LES (*Large Eddy Simulation*) qui adapte la modélisation en fonction de la taille des structures liquides et celle du maillage utilisé pour les discrétiser. La prédiction de la taille des gouttes issues de l'atomisation primaire reste en particulier un verrou dans cette méthodologie : des modèles sous-maille doivent intervenir afin de prendre en compte les échelles liquides non résolues par le maillage, complétant ainsi le caractère prédictif de la simulation, de l'atomisation jusqu'à la combustion. Dans ce contexte, l'objectif de cette thèse est d'apporter les améliorations nécessaires à la stratégie de simulation numérique permettant d'obtenir une description fidèle des flammes diphasiques cryogéniques, en développant en particulier un modèle d'atomisation enrichi. La stratégie de modélisation LES des petites échelles sera basée sur l'utilisation d'une équation de transport supplémentaire décrivant la densité d'aire interfaciale contenue dans une cellule. Cette information permettra d'obtenir une échelle caractéristique des structures liquides, et sera utilisée par le couplage pour définir une distribution locale de diamètre de la phase dispersée lors de sa génération. Cependant, la fermeture des termes sources décrivant sa création et sa destruction locales dans le cadre d'une LES est à l'heure actuelle un défi majeur. Pour cela, des simulations DNS (*Direct Numerical Simulation*) ont été utilisées afin de permettre de mieux comprendre le comportement de l'interface et de proposer une modélisation en conséquence. Le modèle développé dans cette thèse est basée sur une formulation issue de la littérature dont le terme source a été adapté à l'atomisation assistée. Le modèle a ensuite été validé sur une configuration caractéristique de ce régime d'atomisation par comparaison aux simulations DNS. Enfin, la première simulation LES avec l'ensemble des échelles diphasiques calculées de manière locale a été réalisée en utilisant la modélisation de la densité d'aire interfaciale pour estimer une taille de goutte atomisée.

**Mots clés :** Oxygène liquide, Atomisation, Diphasique, Fusée, Modélisation

---

## Abstract

Future rocket engines for European launchers are being designed with a view to increase their reliability and reduce their cost. Therefore, the complex physical phenomena involved in their operation need to be better understood in order to better estimate the design margins that drive cost and reliability. For liquid propellant rocket engines, the phenomenon of high-frequency combustion instability is highly critical for engine operation. In collaboration with CNES, ONERA is leading research studies on combustion instabilities at subcritical injection conditions. Oxygen (LOx) is liquid when it enters the chamber and is subject to a series of phenomena : dense jet atomization, liquid clusters and droplet fragmentation, droplet evaporation, turbulent combustion. These phenomena must be accurately simulated in order to better understand their role in triggering combustion instabilities resulting from a strong coupling between all these phenomena. The numerical simulation of two-phase flows is a key issue, as they involve different characteristic scales as well as high gradients. ONERA has developed a LES (Large Eddy Simulation) strategy in the CEDRE code, which uses the most appropriate model depending on the size of the fluid structures and the size of the mesh used for their discretization. The prediction of the droplet size resulting from the primary atomization remains a key point of this methodology : subgrid models remain to be used to take into account the liquid scales not resolved by the mesh, thus improving the predictive character of the simulation, from atomization to combustion. In this context, the aim of this work is to add the necessary improvements to the numerical simulation to obtain an accurate description of cryogenic two-phase flames, in particular by developing an enriched atomization model. To improve the modeling, attention will be paid to the characterization of the liquid-gas interface at the mesh level in the framework of a diffuse interface model. The LES modeling strategy for small scales will be based on the use of an additional transport equation describing the interface area density contained in a mesh cell. This information will provide a characteristic scale of liquid structures based on the volume/surface ratio and will be used by the coupling to define a local diameter distribution of the dispersed phase at the time of its formation. However, formulating the source terms describing its local creation and destruction in the LES framework is currently a major challenge. To achieve this, DNS (Direct Numerical Simulations) have been used to gain a better understanding of the interfacial behavior and to propose a suitable modeling approach. The model developed in this work is based on a formulation from the literature, with the source term adapted for assisted atomization. The model was then validated against a configuration characteristic of this atomization regime by comparison with DNS simulations. Finally, the first Large Eddy Simulation with all two-phase scales calculated locally was performed using the interface area density modeling to estimate the size of the atomized droplets.

**Keywords :** Liquid-oxygen, Atomization, Two-phase, Rocket, Modeling

# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>xiii</b>
<b>1. Propulsion spatiale et fonctionnement des moteurs cryogéniques</b>	<b>1</b>
1.1. Historique de la propulsion	1
1.1.1. Débuts de la propulsion fusée	1
1.1.2. Propulsion moderne	2
1.1.3. L'âge d'or de l'astronautique	3
1.1.4. L'après course à la Lune...	4
1.2. Fonctionnement d'un moteur fusée	4
1.2.1. Propulsion solide/liquide	4
1.2.2. Conditions de fonctionnement	4
1.2.3. Injecteurs moteurs fusées	5
1.2.4. Instabilités de combustion	7
<b>2. Analyse du phénomène d'atomisation pour la propulsion cryogénique</b>	<b>9</b>
2.1. Classification des régimes d'atomisation assistée	10
2.1.1. Nombres adimensionnels	10
2.1.2. Régimes d'atomisation	13
2.1.3. Décomposition du phénomène d'atomisation	14
2.2. Déstabilisation du jet liquide en régime fibre	15
2.2.1. Développement de la couche de mélange	15
2.2.2. Apparitions des instabilités interfaciales	16
2.2.2.1. Instabilité de cisaillement	17
2.2.2.2. Instabilité transverse	18
2.3. Vers la formation de gouttes	19
2.3.1. Elongation des ligaments	19
2.3.2. Brisure des ligaments en gouttes	19
2.3.3. Fragmentation secondaire	20
2.3.3.1. Temps caractéristiques	21
2.3.3.2. Taille de goutte à l'équilibre	22
2.4. Grandeurs macroscopiques de l'atomisation assistée	23
<b>3. Simulation des écoulements diphasiques</b>	<b>25</b>
3.1. Equations de Navier-Stokes monophasiques	26
3.1.1. Simulation Numérique Directe	27
3.1.2. Filtrage des équations	28
3.1.2.1. Reynolds-Averaged Navier-Stokes	30
3.1.2.2. Simulation aux grandes échelles	32
3.2. Écoulements diphasiques	32
3.2.1. Méthodes à un fluide avec reconstruction d'interface	34
3.2.1.1. Suivi d'interface	34
3.2.1.2. Méthodes à capture d'interface	34
3.2.1.3. Code DyJeAT	38
3.2.2. Méthodes multi-fluides à interface diffuse	42
3.2.2.1. Modèle général	42
3.2.2.2. Relaxation du modèle de Baer-Nunziato	43
3.2.2.3. Solveur CHARME de CEDRE	44
3.2.3. Phase dispersée cinétique	49
3.2.3.1. Méthode full spray	50
3.2.3.2. Méthodes lagrangiennes	50

3.2.3.3.	Méthodes eulériennes . . . . .	52
3.2.3.4.	Interaction avec la phase porteuse . . . . .	55
3.2.4.	Approche multi-échelles . . . . .	58
3.2.4.1.	Modélisation de l'atomisation primaire . . . . .	62
3.2.4.2.	Pseudo-coalescence . . . . .	64
3.3.	Bilan sur les codes disponibles . . . . .	65
<b>4.</b>	<b>Caractéristiques de la configuration coaxiale</b>	<b>67</b>
4.1.	Démarche d'étude . . . . .	67
4.2.	Choix de la configuration coaxiale . . . . .	68
4.2.1.	Contraintes pour la sélection de la configuration . . . . .	68
4.2.2.	Points de fonctionnement . . . . .	68
4.3.	Description de la simulation DNS . . . . .	70
4.4.	Résultats DNS de référence . . . . .	71
4.4.1.	Outil de caractérisation d'un spray à interface reconstruite . . . . .	72
4.4.1.1.	Introduction de l'outil . . . . .	72
4.4.1.2.	Fonctionnement de l'algorithme . . . . .	73
4.4.1.3.	Quantification des structures liquides . . . . .	73
4.4.2.	Caractérisation d'un spray coaxial DNS . . . . .	76
4.4.2.1.	Longueur de cœur liquide . . . . .	77
4.4.2.2.	Analyse du spray . . . . .	77
4.4.2.3.	Densité d'aire interfaciale . . . . .	81
<b>5.</b>	<b>Simulation aux grandes échelles de l'atomisation</b>	<b>85</b>
5.1.	Simulation par interface diffuse . . . . .	86
5.1.1.	Domaine de calcul et discrétisation spatiale . . . . .	86
5.1.2.	Modèles numériques . . . . .	88
5.1.3.	Stratégie de simulation . . . . .	89
5.1.4.	Validation des conditions d'atomisation . . . . .	90
5.2.	Identification d'échelles de coupure diphasique . . . . .	92
5.2.1.	Interprétation reconstruite . . . . .	92
5.2.1.1.	Cas de convection d'une goutte . . . . .	92
5.2.1.2.	Application au cas coaxial . . . . .	95
5.2.2.	Interprétation diffuse . . . . .	97
5.2.2.1.	Principe de mesure . . . . .	98
5.2.2.2.	Échelle de coupure en volume . . . . .	100
5.2.2.3.	Résolution en surface . . . . .	102
5.2.2.4.	Diffusion spatiale . . . . .	103
5.2.3.	Bilan sur les approches diffuse et reconstruite . . . . .	105
<b>6.</b>	<b>Modélisation de l'atomisation primaire pour une approche multi-échelles</b>	<b>107</b>
6.1.	Modèles de densité d'aire interfaciale . . . . .	109
6.1.1.	Surface de flamme . . . . .	110
6.1.2.	Modélisation de Vallet . . . . .	110
6.1.3.	Modèle de Jay . . . . .	111
6.1.4.	Modèle de Lebas . . . . .	111
6.1.5.	Modèle de Chesnel . . . . .	112
6.2.	Configurations numériques d'étude . . . . .	114
6.2.1.	Maillages et étude de convergence . . . . .	114
6.2.2.	Stratégie de validation du modèle . . . . .	115
6.3.	Modélisation de la densité d'aire interfaciale . . . . .	116
6.3.1.	Fréquence d'atomisation . . . . .	117
6.3.2.	Weber critique . . . . .	117

6.3.3.	Localisation de l'atomisation . . . . .	118
6.3.4.	Dépendance du maillage . . . . .	119
6.4.	Estimation du différentiel de vitesse . . . . .	119
6.4.1.	Jets libres monophasiques . . . . .	120
6.4.2.	Décroissance de la vitesse maximale pour un jet coaxial diphasique . . . . .	121
6.4.3.	Vitesse de gaz non dévié . . . . .	122
6.5.	Validation de la modélisation . . . . .	122
6.5.1.	Observations qualitatives . . . . .	122
6.5.2.	Validation du cœur liquide . . . . .	123
6.5.3.	Validation de l'épaisseur de couche de mélange . . . . .	123
6.5.4.	Validation densité d'aire interfaciale . . . . .	126
6.5.5.	Convergence en maillage et sensibilité du modèle . . . . .	127
6.5.5.1.	Convergence en maillage . . . . .	127
6.5.5.2.	Weber critique . . . . .	129
6.5.5.3.	Fonction indicatrice d'atomisation $\lambda_{atom}$ . . . . .	130
<b>7.</b>	<b>Simulation LES de l'atomisation d'un jet coaxial</b>	<b>133</b>
7.1.	Couplage CHARME-SPIREE . . . . .	134
7.2.	Application du couplage sur un cas pratique . . . . .	135
7.2.1.	Configuration d'étude . . . . .	135
7.2.2.	Quantités globales . . . . .	136
7.2.3.	Analyse de la zone d'atomisation . . . . .	139
7.2.4.	Performances . . . . .	143
7.3.	Validation expérimentale . . . . .	144
7.4.	Perspectives . . . . .	145
7.4.1.	Couplage général SPS-DPS . . . . .	145
7.4.2.	Densité d'aire interfaciale . . . . .	145
7.4.3.	Modélisation du différentiel de vitesse . . . . .	147
7.4.4.	Validation du spray . . . . .	147
	<b>Conclusion générale</b>	<b>149</b>
	<b>A. Interface area density model for Large-Eddy Simulation of assisted atomization in fiber regime</b>	<b>153</b>
	<b>B. Champs du couplage SPS-DPS</b>	<b>175</b>
B.1.	Densité d'aire interfaciale . . . . .	175
B.2.	Débit d'atomisation par classe . . . . .	176
B.3.	Fraction volumique de gouttes par classe . . . . .	177
	<b>C. Estimation du volume des structures liquides sur des images d'ombroscopies par apprentissage profond et l'utilisation de simulations haute fidélité</b>	<b>179</b>
	<b>Table des figures</b>	<b>195</b>
	<b>Liste des tableaux</b>	<b>199</b>
	<b>Nomenclature</b>	<b>201</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>205</b>





# Introduction générale

## Objectif de l'étude

L'objectif de cette thèse est de développer et de valider un nouveau modèle d'atomisation pour des simulations numériques diphasiques de l'atomisation assistée. Ce modèle doit apporter une précision accrue nécessaire pour l'étude des couplages entre l'acoustique et le liquide dans les chambres de combustion des moteurs fusées à ergols liquides. Plus globalement, ce modèle permettra de réduire le coût de simulations complexes et ainsi ouvrir la voie à des simulations de configurations industrielles. En particulier, il permettra une meilleure représentation de l'injection liquide représentative des phases d'allumage des moteurs ainsi que des phases stabilisées à bas régime des moteurs rallumables et réutilisables.

## Plan du manuscrit

Ce manuscrit s'organise autour de sept chapitres.

Le [Chapitre 1](#) place le contexte général de cette thèse. D'abord évoquée sous l'aspect historique, la propulsion est un élément clé d'un lanceur. Les différentes technologies utilisées de nos jours sont abordées avec leurs avantages et inconvénients. Dans ce manuscrit on se concentre sur la propulsion à ergols liquides très largement répandue dans l'industrie. Les différentes conditions de fonctionnement de ces moteurs sont ensuite présentées et en particulier le régime sub-critique qui sera étudié tout au long de cette thèse. De plus, les injecteurs classiquement utilisés dans les moteurs à ergols liquides sont introduits et enfin la problématique des instabilités de combustion mettent en évidence l'intérêt de cette thèse.

Le [Chapitre 2](#) donne une vue d'ensemble de la bibliographie théorique et expérimentale sur le phénomène d'atomisation rencontré dans les moteurs fusée à ergols liquides. En particulier, on se concentre sur des injecteurs coaxiaux pour lesquels ont été identifiés des régimes d'atomisation aboutissant à des sprays très variés. Les différents mécanismes physiques associés à l'atomisation sont explicités car il serviront aux modélisations des chapitres suivants. Aussi, les corrélations des principales grandeurs macroscopiques du jet et du spray issues de la littérature sont également énoncées.

Le [Chapitre 3](#) présente les méthodes pour simuler les écoulements introduits dans le chapitre précédent. Dans un premier temps, les équations de Navier-Stokes et les problématiques associées au traitement de la turbulence sont évoquées. Ensuite, l'ensemble des modélisations diphasiques sont abordées en détail avec un focus tout particulier sur celles employées dans les codes CEDRE et DyJeAT utilisés par la suite dans le manuscrit.

La démarche d'étude de cette thèse est définie dans le [Chapitre 4](#). Tout d'abord, les différentes configurations envisagées sont présentées ainsi que les raisons du choix de la configuration et du point de fonctionnement retenus. La suite du chapitre se concentre sur la simulation DNS qui a été réalisée en parallèle de cette thèse par J.C. Hoarau, et dont les résultats ont été notamment post-traités durant cette thèse afin de produire des données de validation pour les chapitres suivants.

Le [Chapitre 5](#) porte sur la simulation des grandes échelles diphasiques de l'atomisation par la méthode à interface diffuse utilisée dans le code CEDRE. Pour cela, deux méthodes sont envisagées pour caractériser le spray. La première considère l'interface comme infiniment mince malgré la diffusion et est identifiée comme une iso-surface de fraction volumique de liquide tandis que

la seconde prend en compte toute l'épaisseur de l'interface. Les comparaisons réalisées à la simulation de référence du chapitre précédent mettent ainsi en évidence des échelles de coupures diphasiques qui seront utilisées dans la modélisation du chapitre suivant.

Le [Chapitre 6](#) traite l'aspect de modélisation du phénomène d'atomisation. Le calcul d'une taille de goutte atomisée est abordé par une approche utilisant la densité d'aire interfaciale. Basée sur la littérature, une modélisation adaptée à l'atomisation assistée est développée. La formulation du modèle dépend notamment du différentiel de vitesse entre le liquide et le gaz qui doit être estimé. La modélisation est validée par comparaison à la DNS de référence sur plusieurs maillages et une étude paramétrique des principales variables du modèle est réalisée.

L'ensemble des développements de cette thèse est appliqué sur une simulation finale dans le [Chapitre 7](#). Ainsi, les échelles de coupures diphasiques identifiées permettent de positionner précisément la limite de résolution du maillage envisagé et de paramétrer la modélisation de la phase dispersée en conséquence. De plus, la modélisation de la densité d'aire interfaciale est utilisée pour la première fois dans le calcul d'une taille de goutte atomisée dépendant des conditions locales de l'écoulement. Les statistiques des gouttes atomisées dans tout le domaine et dans une zone caractéristique identifiée sont présentées afin de mettre en évidence l'apport de cette thèse. Le chapitre est conclu par les perspectives envisagées sur les travaux réalisés.

# Propulsion spatiale et fonctionnement des moteurs cryogéniques

Ce chapitre, on présente le contexte dans lequel s’inscrit cette thèse. Il débute par un rappel historique de la propulsion spatiale, de sa découverte accidentelle jusqu’à la propulsion utilisée sur les lanceurs modernes. Le fonctionnement d’un moteur fusée à propergols solides et à ergols liquides est ensuite détaillé. Une attention particulière est donnée à la propulsion liquide qui est le sujet de cette thèse, tout d’abord en détaillant les conditions de fonctionnement des moteurs et de leurs ergols lors de leur injection dans la chambre de combustion. Les différents types d’injecteurs utilisés par l’industrie sont présentés et enfin, la problématique des instabilités de combustion est abordée pour mettre en évidence l’intérêt d’étudier le jet liquide et son atomisation en spray dans cette thèse.

## Sommaire

<b>1.1. Historique de la propulsion</b>	<b>1</b>
1.1.1. Début de la propulsion fusée	1
1.1.2. Propulsion moderne	2
1.1.3. L’âge d’or de l’aéronautique	3
1.1.4. L’après course à la Lune...	4
<b>1.2. Fonctionnement d’un moteur fusée</b>	<b>4</b>
1.2.1. Propulsion solide/liquide	4
1.2.2. Conditions de fonctionnement	4
1.2.3. Injecteurs moteurs fusées	5
1.2.4. Instabilités de combustion	7

## 1.1. Historique de la propulsion

### 1.1.1. Début de la propulsion fusée

Les premières évocations d’engins propulsés apparaissent de manière très sporadique dans les archives de plusieurs cultures. Au premier siècle de notre ère, les Chinois disposaient, semble-t-il, d’une forme simple de poudre à canon fabriquée à partir de salpêtre, de soufre et de poussière de charbon de bois. Pour créer des explosions lors des fêtes religieuses, ils remplissaient des tubes de bambou de ce mélange et les jetaient dans le feu. Il est possible que certains de ces tubes n’aient pas explosé et qu’ils aient plutôt glissé hors du feu, propulsés par les gaz et les étincelles produits par la poudre à canon en combustion. La première vraie fusée semble donc être apparue de manière accidentelle. Rapidement, cette découverte a été utilisée par les Chinois à des fins militaires en remplissant des tubes de poudre à canon pour les attacher sur des flèches. La première véritable fusée est apparue peu après, propulsée uniquement par l’éjection de gaz. Ils l’ont utilisée en 1232 lors de la guerre contre les Mongols. La fusée représentée sur la [Figure 1.1](#) était alors attachée à un manche qui lui servait de guidage passif.

C’est lors de l’invasion Mongol entre le XIII<sup>ème</sup> et de XIV<sup>ème</sup> siècle que cette technologie s’exporte en Europe, où l’on note la première trace d’une fusée à étage par Johann Schmidlap un



FIGURE 1.1. – Soldat Chinois lançant une fusée à poudre

fabricant de feux d'artifice en Allemagne au XVI<sup>ème</sup> siècle. Au XVII<sup>ème</sup> siècle la propulsion est théorisée par les lois de Newton décrivant la dynamique des corps que l'on appelle la mécanique classique (ou Newtonienne).

### 1.1.2. Propulsion moderne

La propulsion des fusées telle que nous la connaissons aujourd'hui vient d'un instituteur russe Konstantin Tsiolkovski qui est considéré comme le fondateur du spatial Soviétique par la publication de son ouvrage *Exploration de l'univers par des engins à réaction* en 1903. Il décrit comment l'homme pourrait s'aventurer à des altitudes supérieures à celles des ballons. On lui doit notamment le terme "Sputnik" pour qualifier un objet artificielle en orbite. Il émet également l'idée de l'utilisation d'un carburant liquide (de l'hydrogène ou des molécules carbonées) associé à de l'oxygène liquide, comme source d'énergie pour la propulsion. La Figure 1.2 est un schéma de fusée proposé par Tsiolkovski où l'oxygène liquide est évaporé par une variation de température dans la zone A. Le carburant liquide est stocké dans le compartiment B et l'équipage se trouve dans la zone C.

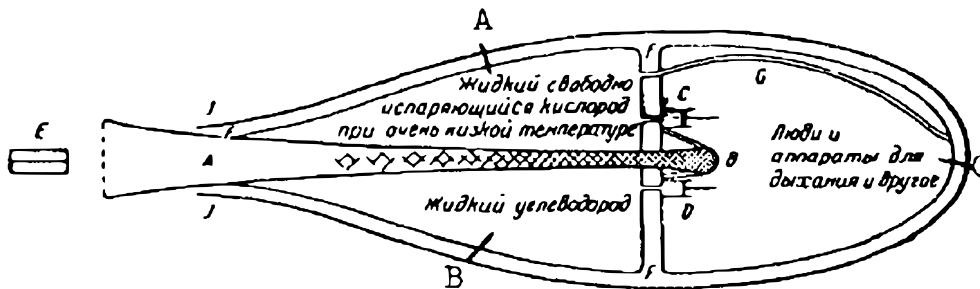


FIGURE 1.2. – Schéma de fusée de Tsiolkovski

Enfin, il formule l'équation qui porte son nom, décrivant la variation de vitesse  $\Delta V$  engendrée par la variation de masse de  $m_{\text{initiale}}$  à  $m_{\text{finale}}$  éjectée à une vitesse  $u_{\text{eject}}$  :

$$\Delta V = u_{\text{eject}} \ln \left( \frac{m_{\text{initiale}}}{m_{\text{finale}}} \right). \quad (1.1)$$

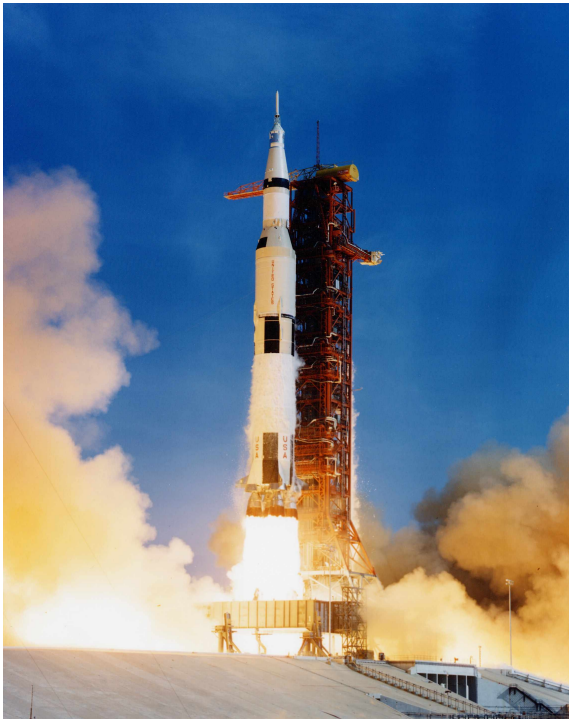
Malheureusement ce n'est que bien plus tard que ses travaux sont traduits et transmis à la communauté internationale. Dans la même période et sans connaissance des travaux de Tsiolkovski, Robert H. Goddard conduit les premières expériences sur des moteurs fusées à ergols liquides aux États-Unis. En 1926, il réussit à faire voler la première fusée à ergols liquides fonctionnant à l'oxygène liquide et à l'essence pendant 2.5 s, atteignant une altitude de 12.5 m. En Europe, Hermann Oberth mène à la fois des travaux théoriques et expérimentaux sur les moteurs fusées et publie en 1923 un livre sur ses travaux *The Rocket to the Planetary Spaces* (Dont la traduction française s'intitule "Les hommes dans l'espace (de satellites artificiels aux planètes habitables)").

Il inspira de nombreux ingénieurs à se tourner vers la réalisation de fusées. Ses travaux aboutiront au missile V2 développé sous la direction de Wernher von Braun, qui terrorisa Londres durant la seconde guerre mondiale.

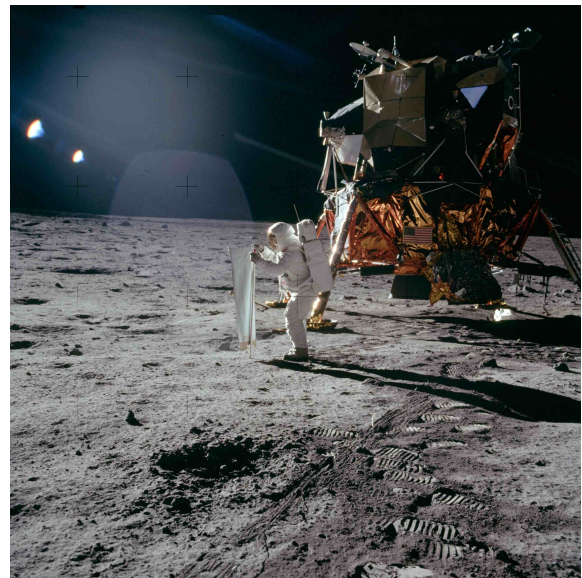
### 1.1.3. L'âge d'or de l'astronautique

Après la seconde guerre mondiale, les alliés s'arrachent les meilleurs ingénieurs allemands alors à la pointe du domaine. Avec la guerre froide qui s'amorce alors, l'accès à l'espace devient une capacité clé qu'il faut maîtriser pour prendre un avantage stratégique sur son adversaire. En octobre 1957, dirigé par Sergueï Korolev, les soviétiques marquent en premier les esprits en mettant en orbite le premier satellite artificiel "Sputnik I". Moins d'un mois plus tard, ils envoient le premier être vivant dans l'espace, la chienne "Laïka". S'amorce alors une course aux premières réalisations en orbite entre l'URSS et les États Unis avec plusieurs dizaines de lancements par an de chaque côté du bloc mais avec un nombre important d'échecs. En 1961 les soviétiques marquent une nouvelle étape importante en envoyant le premier être humain dans l'espace, Youri Gagarine, à bord du vaisseau Vostok.

Un an plus tard, et malgré le retard pris par les États-Unis, le président J.F.Kennedy lance une course à la Lune face à l'Union Soviétique lors d'un discours qui restera célèbre. En 1965 A.Leonov réalise la première sortie extravéhiculaire (ou EVA pour *Extra Vehicular Activity*) alors que le développement d'un lanceur lunaire est en cours des deux côtés du Pacifique. Le déclin de l'Union Soviétique retarde considérablement le développement de la fusée N-1 dont le programme subit de gros revers suite aux échecs des premiers lancements. Le 16 juillet 1969, le lanceur lourd américain, la Saturn V, décolle depuis le Kennedy Space Center en Floride (Figure 1.3 (a)) avec à son bord un équipage pour poser le premier pas de l'homme sur la Lune. Le 21 juillet 1969, le module lunaire atterrit sur le site de la Mer de Tranquillité. Après la réalisation de quelques expériences (Figure 1.3 (b)), les astronautes reviennent sur Terre 3 jours plus tard et mettent fin à la course à la Lune.



(a)



(b)

FIGURE 1.3. – (a) Lancement de la Saturn V emportant l'équipage d'Apollo 11 vers la Lune et (b) Buzz Aldrin mettant en place une expérience de voile solaire près du module lunaire

### 1.1.4. L'après course à la Lune...

À la suite d'Apollo 11, 5 autres missions Apollo amèneront 12 personnes au total à marcher sur la Lune. La fin de la course à la Lune marque cependant une restriction budgétaire importante et oblige la NASA ainsi que les autres agences à revoir leurs ambitions à la baisse et de se contenter de l'orbite basse terrestre. Une collaboration internationale débute alors pour la création de stations spatiales qui aboutira à l'ISS (*International Space Station*) toujours active aujourd'hui.

En Europe, le CNES créé depuis 1961 développe ses premiers lanceurs et place en 1965 son premier satellite Astérix en orbite par une fusée Diamant. En 1975 l'agence spatiale européenne (ESA) est créée afin de regrouper les efforts des nations spatiales européennes. D'un point de vue lanceur, c'est le début de la gamme Ariane qui devient leader sur les lancements commerciaux à la fin du XX<sup>ème</sup> siècle.

## 1.2. Fonctionnement d'un moteur fusée

### 1.2.1. Propulsion solide/liquide

La propulsion spatiale nécessite d'emporter à la fois son carburant et son comburant afin de pouvoir fonctionner dans le vide spatial. On distingue deux types de propulsion utilisés sur un lanceur :

- moteur à propulsion solide, composé d'un bloc de propergol comportant à la fois le carburant et le comburant. Placé dans un tube, la combustion du propergol est réalisée en son centre, le consommant jusqu'aux parois sans pouvoir être arrêté. L'éjection des gaz brûlés se fait par une tuyère placée à son extrémité. Ce type de moteur est utilisé comme premier étage des fusées Ariane 5 et Ariane 6 car il fournit une poussée élevée permettant au lanceur de s'arracher du sol.
- moteur à propulsion liquide utilisant comme son nom l'indique un carburant et un comburant liquides stockés dans des réservoirs séparés. La plupart des ergols utilisés sont stockés à des températures cryogéniques, afin de minimiser le volume des réservoirs, ce qui ne les rend pas conservables sur le long terme (rendant difficile les missions interplanétaires). Afin d'alimenter la chambre de combustion principale en ergols, le moteur utilise des turbo-pompes qui augmentent considérablement la pression du système par rapport à celle des réservoirs. Si le comburant utilisé est systématiquement de l'oxygène liquide, le carburant varie, par exemple du kérosène pour le moteur Merlin de la Falcon 9, de l'hydrogène pour le moteur Vulcain 2.1 d'Ariane 6 représenté sur la [Figure 1.4](#) ou du méthane pour le moteur Prometheus qui équipera Themis et les futurs lanceurs de la gamme Ariane. Les moteurs à ergols liquides offrent une poussée plus faible que les moteurs à propergols solides mais rendent possible une poussée modulable et son rallumage. Enfin, l'impulsion spécifique qui caractérise la performance du moteur, est plus élevée dans un moteur à ergols liquides que dans un moteur à propergol solide.

L'ensemble de ces caractéristiques rend la propulsion liquide une solution de choix, d'autant plus que la ré-utilisabilité devient une condition indispensable pour les futurs lanceurs commerciaux.

### 1.2.2. Conditions de fonctionnement

Les moteurs à ergols liquides ont des points de fonctionnements très variés. En fonctionnement nominal, le carburant est généralement injecté sous forme gazeuse dans la chambre de combustion car il sert à refroidir les parois de la chambre de combustion et de la tuyère avant son injection. Dans cette section on se concentre sur l'oxygène liquide qui peut avoir des conditions très variées. Afin d'évoquer les différentes configurations possibles, la [Figure 1.5](#) trace quelques-uns des points de fonctionnement des moteurs à ergols liquides de la gamme Ariane :

- D'un point de vue général, l'allumage d'un moteur à ergols liquides est un instant critique où les conditions dans la chambre de combustion mènent à un écoulement sub-critique.



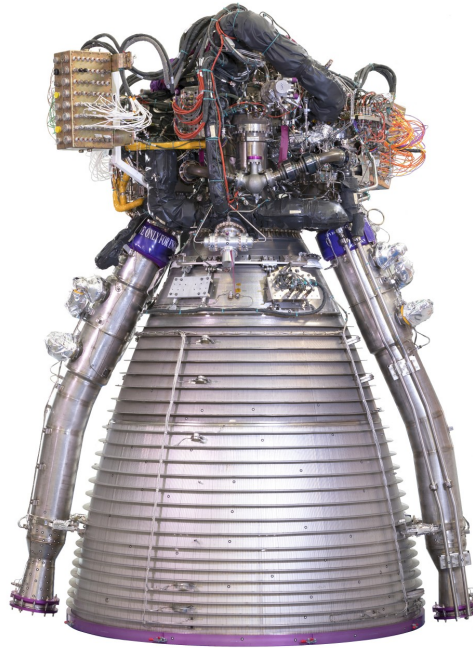


FIGURE 1.4. – Moteur Vulcain 2.1

L'oxygène est liquide et le carburant est gazeux dans le cas de l'utilisation de l'hydrogène (par détente) mais peut aussi transiter par la phase liquide dans le cas du méthane. Rallumer un moteur de second étage est une caractéristique intéressante puisqu'elle permet d'offrir de nouveaux profils de mission (comme par exemple circulariser une orbite géostationnaire) mais avec la réutilisation ce sont aussi les moteurs du premier étage qui doivent être rallumés afin de réaliser un atterrissage propulsif.

- En fonctionnement nominal, un moteur à ergols liquides injecte généralement de l'oxygène liquide en régime transcritique (Vulcain 2, Vinci, etc.) à cause de la pression élevée de la chambre et de la température très faible du liquide.
- Quelques moteurs sont opérés en fonctionnement nominal en injectant de l'oxygène liquide en sub-critique. C'est par exemple le cas du moteur de second étage d'Ariane 5 le HM7B ou celui du moteur Vinci sur son point de fonctionnement à mi-poussée.

On met ainsi en évidence l'importance de maîtriser l'injection en condition sub-critique rencontrée dans les phases critiques du fonctionnement d'un moteur à ergols liquides. Dans la suite de cette thèse, on se concentre sur cette condition d'injection spécifique avec un carburant gazeux et un comburant liquide.

### 1.2.3. Injecteurs moteurs fusées

Plusieurs types d'injecteurs ont été développés pour les moteurs fusées à ergols liquides afin de mélanger le plus efficacement possible le comburant (l'oxygène liquide) et le carburant, et peuvent être rangés en plusieurs catégories. Le premier système d'injecteurs consiste à faire impacter le jet d'oxygène avec le jet du carburant et est représenté sur la [Figure 1.6 \(a\)](#). C'est cette technologie qui a été retenue dans le moteur F1 de la Saturn V avec 1428 injecteurs pour l'oxydant et 1400 injecteurs pour le carburant. Des systèmes d'injections plus complexes font intervenir plusieurs jets d'oxygène et de carburant ou avec des angles différents. La limitation vient généralement de la réalisation pratique du système d'injection avec des orifices très petits et rapprochés. La seconde catégorie contient deux types d'injecteurs. L'oxydant est généralement injecté dans un cylindre et le carburant dans un anneau autour de l'oxydant. La première solution consiste à injecter directement ce mélange dans la chambre de combustion, on parle alors d'injecteur coaxial. Ce type d'injecteur a l'avantage de fournir un débit très important, de limiter la taille de la chambre



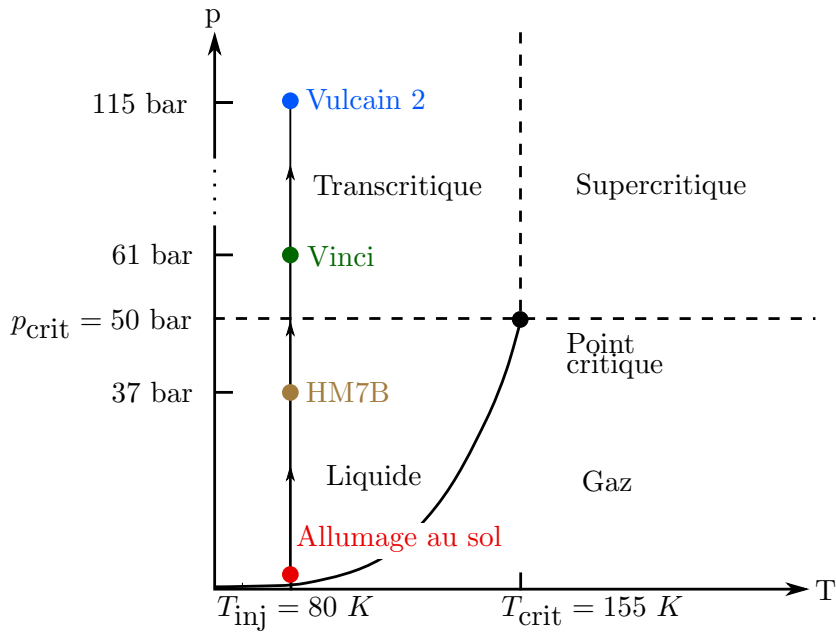


FIGURE 1.5. – Diagramme des phases de l'oxygène dans l'espace p-T des points de fonctionnement des moteurs de la gamme Ariane, Rutard [2019]

de combustion et d'avoir un bon mélange entre l'oxygène et son carburant et donc permet une bonne combustion des ergols. Afin d'accélérer encore le mélange, le carburant peut être injecté avec un mouvement de rotation initial, on parle alors d'injecteur *swirl* dont un exemple est donné sur la Figure 1.6 (c). Enfin, on peut aussi placer un obstacle mobile en translation à l'extrémité du cylindre d'oxydant afin de donner un angle non nul entre le jet de carburant et d'oxydant. Cette technologie a l'avantage de stabiliser la combustion et de permettre de moduler la poussée du moteur en faisant varier la taille de l'orifice d'injection de l'oxydant : il s'agit de l'injecteur *pintle*. Cette technologie qui a été choisie pour l'unique injecteur du moteur de descente de l'atterrisseur des missions Apollo, dont un schéma est donné sur la Figure 1.6 (b). Cependant, cette technologie souffre notamment de problématiques de refroidissement de l'obturateur et offre une efficacité théorique plus faible que l'injection coaxiale.

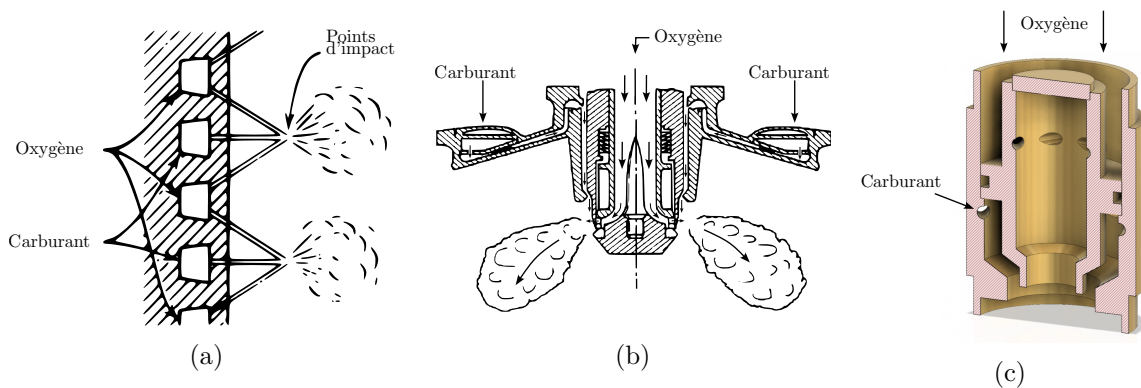


FIGURE 1.6. – (a) Injecteur à impact de jet utilisé sur le moteur F1, (b) Schéma de l'injecteur *pintle* du lander Apollo et (c) Dessin injecteur coaxial *swirl* de Copenhagen Suborbitals

Dans cette thèse, on étudie les injecteurs coaxiaux qui sont de plus en plus utilisés sur les moteurs modernes car ils permettent d'atteindre des efficacités théoriques proches de 100% et donc d'en maximiser les performances. Cependant, ce type d'injecteur a tendance à faire apparaître des instabilités de combustion (Urbano et Selle [2017], Rey *et al.* [2004], Hardi *et al.* [2014]), phénomène introduit dans la section suivante.

#### 1.2.4. Instabilités de combustion

Lors du développement d'un moteur fusée à ergols liquides, il est important de comprendre l'ensemble des phénomènes physiques en jeu dans la chambre de combustion. En particulier, les instabilités de combustion, issues d'un couplage entre le dégagement de chaleur par la flamme et l'acoustique dans la chambre de combustion, voire dans les dômes d'injection ou les injecteurs, sont de première importance car elles peuvent mener à une perte de performance et même à la destruction du moteur. La Figure 1.7 montre le fond de chambre d'un des 4 moteurs F1 de la Saturn V de la mission Apollo 11 après le vol. On distingue les différents compartiments d'injecteurs séparés par des baffles censés casser les modes acoustiques transverses réputés les plus critiques, et limiter les instabilités de combustion. Avec l'endommagement de la structure observé, on peut comprendre la complexité de réutiliser un moteur après un vol.



FIGURE 1.7. – Fond de chambre d'un des moteurs F1 de la Saturn V d'Apollo 11 après le vol

Cette thèse s'inscrit dans une démarche globale de compréhension et de maîtrise de la phénoménologie de l'injection coaxiale liquide à l'ONERA. En particulier, on se concentre sur le phénomène d'atomisation du jet liquide pour générer le spray de comburant, qui, faisant partie de la cascade de phénomènes menant à la combustion, joue un rôle dans l'apparition des instabilités de combustion.

### Bilan

Ce premier chapitre a permis de donner le contexte général dans lequel s'inscrivent ces travaux de thèse et de montrer de potentiels domaines d'applications pour les résultats qui en découlent.

L'aspect historique de la propulsion spatiale a été abordé, de sa découverte au I<sup>er</sup> siècle par hasard, en passant par les trois pères de l'aéronautique (Tsiolkovski, Goddard et Oberth) qui ont permis de développer les moteurs fusées modernes jusqu'à nos jours.

Dans un second temps, le fonctionnement des moteurs fusées a été introduit, à la fois pour la propulsion solide et liquide. Cette thèse se concentrant sur la propulsion liquide, les conditions de fonctionnement rencontrées pour les moteurs à ergols liquides ont été explicitées. Enfin, les instabilités de combustion qui peuvent être rencontrées dans les moteurs fusées à ergols liquides ont été abordées. L'ensemble de ces éléments permet de définir le contexte d'étude de cette thèse qui se concentre sur le régime sub-critique et le phénomène d'atomisation.



# Analyse du phénomène d'atomisation pour la propulsion cryogénique

L'objectif de ce chapitre est de donner une vue d'ensemble de la bibliographie théorique et expérimentale sur le phénomène d'atomisation assistée, en particulier sur les jets coaxiaux. Tout d'abord, les nombres adimensionnels pilotant l'atomisation assistée sont définis et utilisés pour identifier des régimes d'atomisation, ainsi que pour alimenter les corrélations entre les grandeurs d'intérêt.

Ensuite, les deux sections suivantes tracent l'évolution du jet liquide dès sa sortie de l'injecteur, du développement des instabilités interfaciales, en passant par la formation des ligaments jusqu'à leur rupture et la création de gouttes. Les théories et corrélations expérimentales disponibles dans la littérature, de chacune des étapes du processus d'atomisation, seront explicitées et seront utilisées dans la suite du manuscrit pour modéliser des phénomènes et valider des simulations numériques.

## Sommaire

<b>2.1. Classification des régimes d'atomisation assistée</b>	<b>10</b>
2.1.1. Nombres adimensionnels	10
2.1.2. Régimes d'atomisation	13
2.1.3. Décomposition du phénomène d'atomisation	14
<b>2.2. Déstabilisation du jet liquide en régime fibre</b>	<b>15</b>
2.2.1. Développement de la couche de mélange	15
2.2.2. Apparitions des instabilités interfaciales	16
2.2.2.1. Instabilité de cisaillement	17
2.2.2.2. Instabilité transverse	18
<b>2.3. Vers la formation de gouttes</b>	<b>19</b>
2.3.1. Elongation des ligaments	19
2.3.2. Brisure des ligaments en gouttes	19
2.3.3. Fragmentation secondaire	20
2.3.3.1. Temps caractéristiques	21
2.3.3.2. Taille de goutte à l'équilibre	22
<b>2.4. Grandeurs macroscopiques de l'atomisation assistée</b>	<b>23</b>

Le chapitre précédent a permis de mettre en lumière les différents types d'injecteurs industriels, et leurs applications, avec un focus particulier sur les injecteurs rencontrés dans les moteurs fusées à ergols liquides. Deux grandes catégories d'injecteurs ont été mises en évidence, celles engendrant une atomisation mécanique rencontrée notamment dans les moteurs Diesel et les autres générant une atomisation assistée utilisée dans les moteurs aéronautiques et spatiaux. Ces injecteurs ont été très largement étudiés dans la littérature, d'un point de vue théorique et expérimental. Ce chapitre a pour objectif de donner une vue d'ensemble de ces travaux en se concentrant sur les injecteurs coaxiaux et les régimes de fonctionnement rencontrés dans les moteurs fusée à ergols liquides.

## 2.1. Classification des régimes d'atomisation assistée

### 2.1.1. Nombres adimensionnels

Une grande quantité de cas d'études impliquant la mécanique des fluides est disponible dans la littérature concernant des domaines variés comme le transport ou la production d'énergie. Cette grande variété implique l'utilisation de fluides avec des propriétés physiques, des conditions d'injection ainsi que des géométries extrêmement différentes, ce qui complique la comparaison des études entre elles. Pour pallier à cette problématique, des nombres sans dimension, caractéristiques des écoulements étudiés sont définis et permettent d'identifier des régimes indépendants de toute spécificité propre à l'étude (géométrie, fluide, ...). Ces nombres adimensionnels sont très largement utilisés en théorie des maquettes en réduisant l'échelle de l'objet d'étude pour une analyse en soufflerie tout en conservant les conditions réelles d'application. Deux exemples de maquettes à échelle réduite pour des essais en soufflerie sont présentés sur la [Figure 2.1](#).

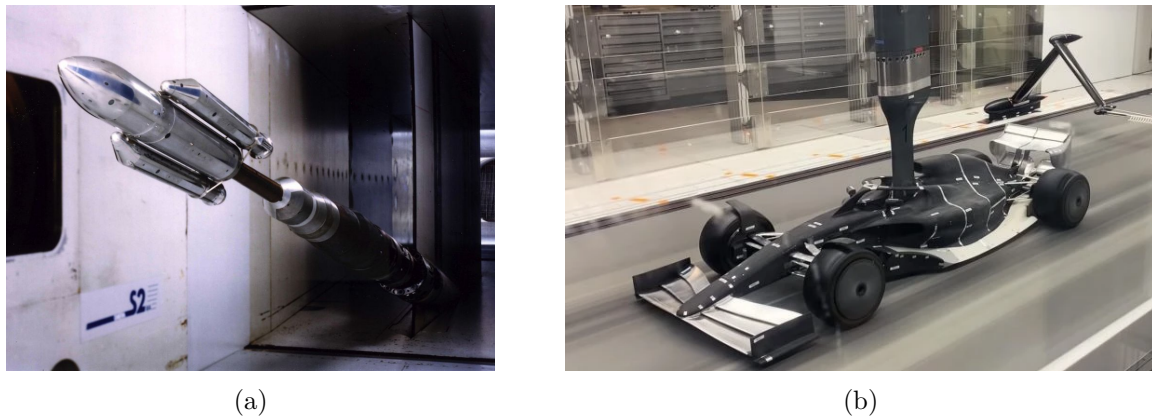


FIGURE 2.1. – Maquettes de soufflerie à échelle réduite : (a) Ariane 5 dans la veine d'une soufflerie à L'ONERA Modane, et (b) F1 2021 Alfa Romeo

Enfin, de manière plus générale, en modifiant certaines propriétés de l'écoulement, du fluide ou de la géométrie tout en conservant certains nombres adimensionnels importants, les études par similitude permettent de comparer des configurations dans des régimes de fonctionnement identiques. C'est par ce principe qu'est choisie la configuration de cette thèse dans la [Section 4.2.2](#).

Ainsi, une multitude de nombres adimensionnels peuvent être définis. La suite de cette section s'attarde sur les principaux nombres utilisés pour caractériser les écoulements diphasiques générant une atomisation assistée. Les indices  $l$  et  $g$  font référence respectivement aux propriétés du liquide et du gaz. Les quantités telles que les vitesses des fluides, normalement considérées à l'infini, sont évaluées à la sortie de l'injecteur.

### Nombre de Reynolds

Le nombre adimensionnel le plus utilisé en mécanique des fluides est le nombre de Reynolds ( $Re$ ) caractérisant le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses. Il peut être défini à la fois pour la phase liquide et gazeuse :

$$Re_l = \frac{\rho_l U_l L_l}{\mu_l}, \quad (2.1)$$

$$Re_g = \frac{\rho_g U_g L_g}{\mu_g}, \quad (2.2)$$

avec  $\rho$  la masse volumique,  $U$  la vitesse,  $L$  une dimension caractéristique de la section de passage de l'écoulement (typiquement le diamètre du canal) et la viscosité dynamique du fluide. Le nombre de Reynolds est utilisé pour déterminer le régime de l'écoulement, laminaire ou turbulent. Les

profils de vitesse typiques de ces deux régimes dans un canal sont représentés sur la [Figure 2.8](#). Dans un canal, le régime laminaire est rencontré lorsque  $Re < 2 \times 10^3$  avec un écoulement dit de Poiseuille et un profil de vitesse parabolique. Le régime turbulent qui concerne la grande majorité des applications industrielles avec  $Re \geq 2 \times 10^3$ , est caractérisé par l'apparition de tourbillons, un profil de vitesse aplati au centre du canal et des couches limites plus fines, avec des gradients plus importants.

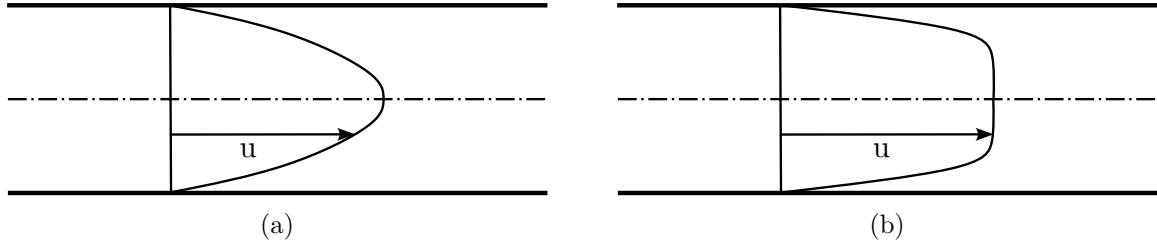


FIGURE 2.2. – Profil de vitesse (a) laminaire et (b) turbulent dans un canal

Le régime turbulent a été très largement étudié dans la littérature et théorisé par [Kolmogorov \[1941\]](#). Un écoulement est dit turbulent lorsque les profils de vitesses présentent des variations de détail autour d'une valeur moyenne indépendante du temps. L'écoulement est caractérisé par un continuum d'échelles de tourbillons, produites aux grandes échelles dominées par les effets convectifs, transférées aux échelles inférieures de tourbillons jusqu'à être dissipées par les effets visqueux. Cette échelle de dissipation est nommée échelle de Kolmogorov. La cascade d'énergie associée à ces phénomènes portant le même nom, est représentée sur la [Figure 2.3](#).

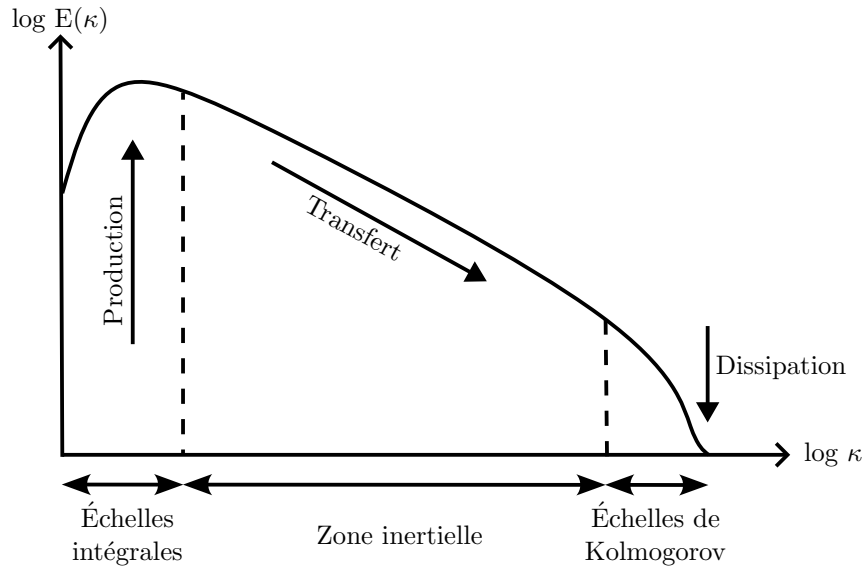


FIGURE 2.3. – Cascade d'énergie turbulente décrite par [Kolmogorov \[1941\]](#)

### Nombre de Weber

Pour les écoulements diphasiques, le nombre de Weber caractérise le rapport entre les forces inertielles et la tension de surface défini comme :

$$We = \frac{\rho_g |U_g - U_l|^2 L_l}{\sigma}, \quad (2.3)$$

avec  $\sigma$  la tension de surface de la phase liquide dans le gaz. La [Figure 2.4](#) illustre le nombre de Weber d'une structure liquide allant à une vitesse  $U_l$  dans un écoulement gazeux de vitesse  $U_g$ .

Le nombre de Weber peut aussi être défini pour le liquide par :

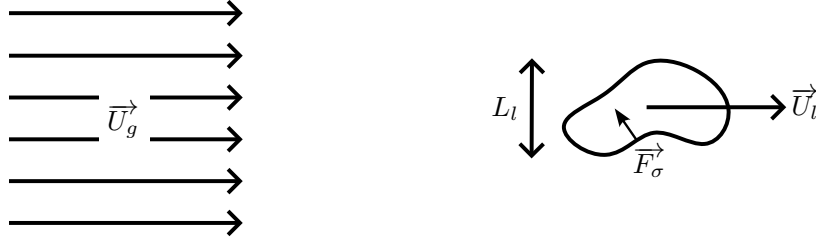


FIGURE 2.4. – Détermination du nombre de Weber d'une structure liquide

$$We_l = \frac{\rho_l U_l^2 L_l}{\sigma}, \quad (2.4)$$

et pour le gaz :

$$We_g = \frac{\rho_g U_g^2 L_l}{\sigma}. \quad (2.5)$$

Le  $We_g$  devient équivalent au  $We$  de l'Equation 2.3 lorsque  $U_l \ll U_g$ . Il est important de noter que, si il est aisé de définir un nombre de Weber pour une goutte isolée dans un écoulement de gaz, la tâche est beaucoup plus ardue lorsque l'on souhaite déterminer un nombre de Weber dans une zone de spray dense où le champ de vitesse perçu par la goutte est non uniforme et influencé par les structures liquides environnantes.

### Nombre d'Ohnesorge

Le nombre d'Ohnesorge caractérise la déformation des structures liquides en estimant le rapport entre les forces visqueuses et les forces capillaire et inertielle. Il est donné par :

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho \sigma L_l}}, \quad (2.6)$$

et peut être relié au  $Re_l$  et au  $We_l$  :

$$Oh = \frac{\sqrt{We_l}}{Re_l}. \quad (2.7)$$

### Rapport des flux de quantité de mouvement

Le rapport des flux de quantité de mouvement  $\mathcal{J}$  est un des nombres adimensionnels principal pilotant l'atomisation assistée et est donné par :

$$\mathcal{J} = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2}. \quad (2.8)$$

De nombreuses corrélations sur des grandeurs caractéristiques du spray détaillées dans la Section 2.2 dépendent de ce nombre.

### Rapport de mélange

Enfin, le rapport de mélange  $\mathcal{R}_m$ , utilisé principalement en écoulement réactif (inversement égal à la richesse) quantifie le rapport de débit massique à l'injection entre l'oxydant liquide et carburant gazeux (en régime subcritique) :

$$\mathcal{R}_m = \frac{\dot{m}_l}{\dot{m}_g}. \quad (2.9)$$



### 2.1.2. Régimes d'atomisation

Les études sur l'atomisation assistée ont permis de mettre en évidence plusieurs régimes en fonction du  $Re_l$ ,  $We_g$  et de  $J$ . Ces différents régimes identifiés dans un premier temps par Chigier et Farago [1992] puis étendus par Hopfinger [1998] et Baillot *et al.* [2009] sont représentés sur la Figure 2.5. Même si les bornes des régimes varient suivant les études, cette carte donne une bonne représentation de tous les régimes rencontrés en atomisation assistée et permet notamment de comparer des points de fonctionnement.

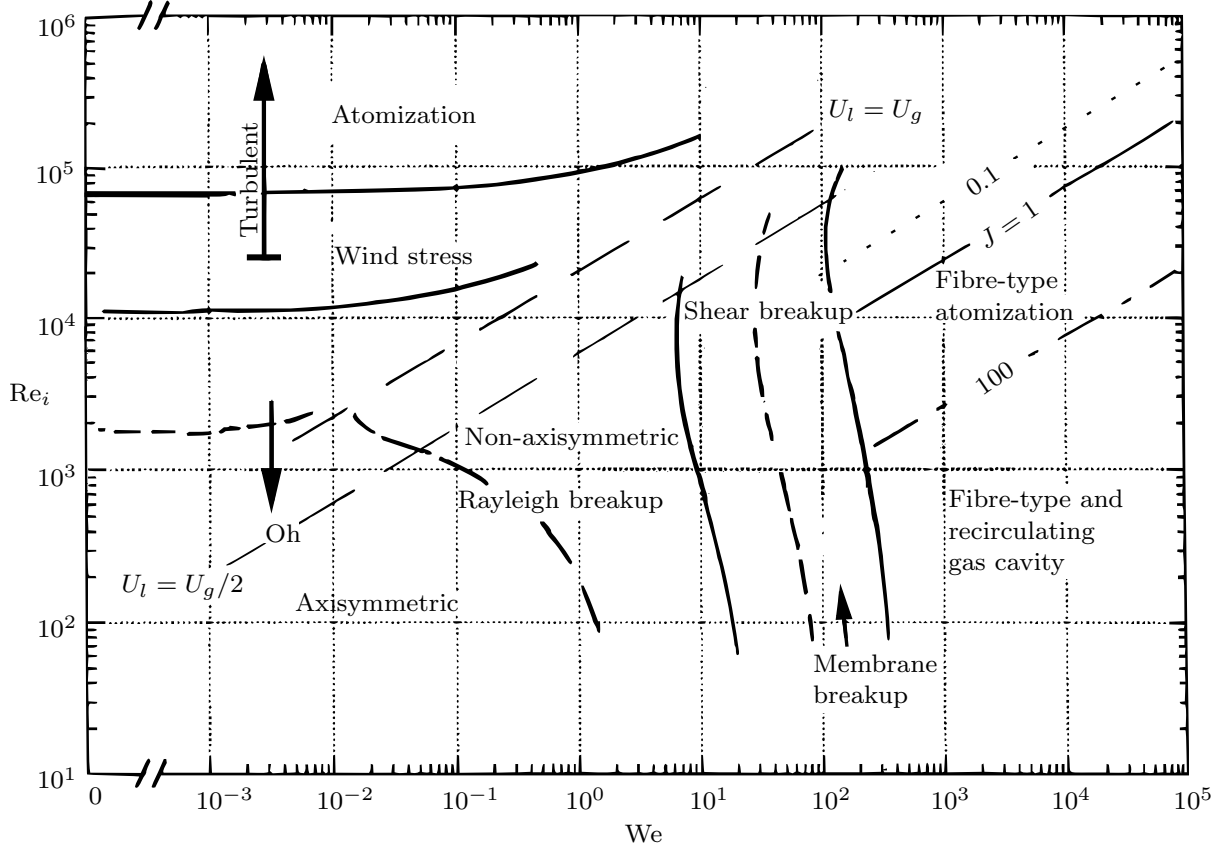


FIGURE 2.5. – Régimes d'atomisation assistée en fonction de  $Re_l$ ,  $We_g$  et  $J$ , Hopfinger [1998] et Baillot *et al.* [2009]

On distingue ainsi 6 régimes d'atomisation listés ci-dessous. Une visualisation de chacun de ces régimes est représentée sur la Figure 2.6, extraits de Chigier et Farago [1992] et Baillot *et al.* [2009].

- Régime de Rayleigh axisymétrique. Ce régime est rencontré pour les plus faibles valeurs de  $We_g$  et  $Re_l$  et est caractérisé par un jet cylindrique de diamètre égal à celui d'injection. Les instabilités capillaires longitudinales décrites dans la Section 2.2.2.1 se développent jusqu'à produire des gouttes avec un diamètre proche de celui de l'injecteur.
- Régime de Rayleigh non-axisymétrique. Lorsque l'on augmente la vitesse d'injection du co-courant gazeux, le cœur liquide prend une forme sinusoïdale avant de se briser en gouttes de taille inférieure à celle du diamètre d'injection liquide.
- Régime d'atomisation par cisaillement (shear breakup). En augmentant la vitesse du gaz, une instabilité axisymétrique apparaît et entraîne la formation de quelques ligaments par le développement d'une instabilité transverse (Section 2.2.2.2). Ce processus est cependant amorti très rapidement par l'instabilité capillaire entraînant la formation de gouttes de diamètre égal à la taille de l'injecteur.
- Régime membrane. A partir d'un seuil de  $We_g$  l'amplitude des oscillations est suffisamment importante pour que le co-courant gazeux impacte directement le jet liquide. L'atomisation



résultante produit des structures de tailles variées mais inférieures au diamètre d'injection liquide.

- Régime fibre. De nombreux ligaments très fins sont produits en sortie d'injecteur et sont rapidement atomisés par le gaz en des structures de plus petites tailles encore. Le restant du cœur liquide s'atomise en des structures de plus grosse taille restant sur l'axe d'injection. C'est ce régime qui est rencontré lors de l'injection subcritique d'oxygène liquide dans les moteurs fusée à ergols liquides.
- Régime fibre superpulsant. Le régime précédent peut voir apparaître des pulsations de l'atomisation du jet liquide causé par des recirculations du gaz interagissant avec le jet liquide. Il est observé pour des valeurs de  $\mathcal{J}$  très élevées ( $\mathcal{J} > 2 \times 10^5 \text{Re}_g^{-1.1}$ ).

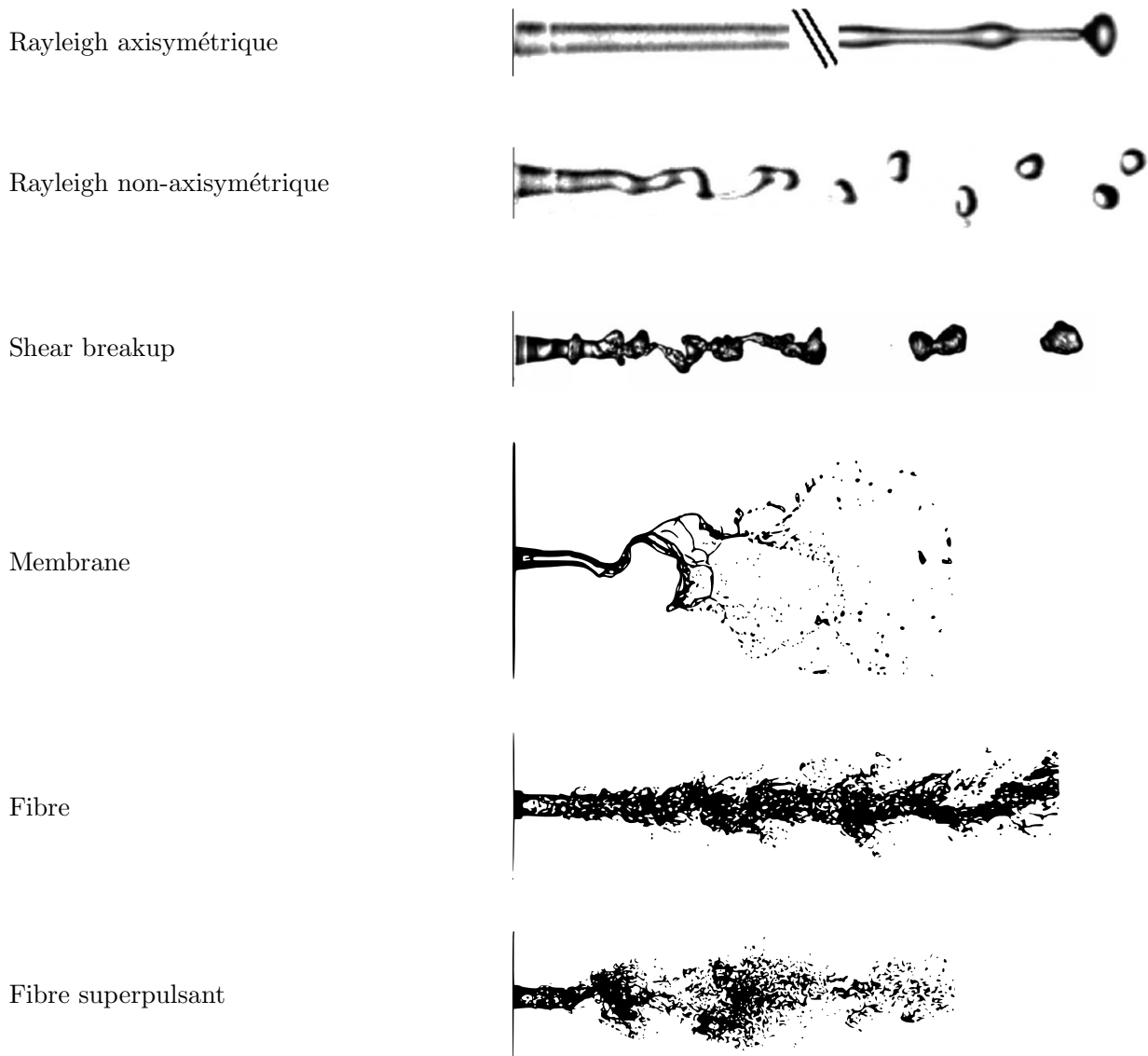


FIGURE 2.6. – Visualisation des régimes d'atomisation assistée issue de Chigier et Farago [1992] et Baillot *et al.* [2009]

### 2.1.3. Décomposition du phénomène d'atomisation

Pour chacun des régimes précédemment décrits, le phénomène d'atomisation peut être décomposé en deux processus :

- des structures liquides sont issues de la rupture du cœur liquide, situées principalement sur l'axe d'injection et prennent une forme qui dépend principalement d'échelles globales

géométriques et cinématiques. Ce phénomène est rencontré dans tous les régimes décrits dans la section précédente.

- lorsque le cœur liquide est "épluché" par le co-courant gazeux, il arrache des structures liquides qui ont des propriétés dépendantes des conditions cinématiques et géométriques de l'interface locale. Ce phénomène est rencontré uniquement pour les régimes ayant un Weber élevé, du régime membrane au régime fibre superpulsant.

Basé sur l'étude des suies de [Kaye \[1994\]](#), [Dumouchel \*et al.\* \[2019\]](#) proposent de nommer ces deux processus atomisation structurelle et texturale respectivement. Les deux processus sont représentés sur la [Figure 2.7](#).

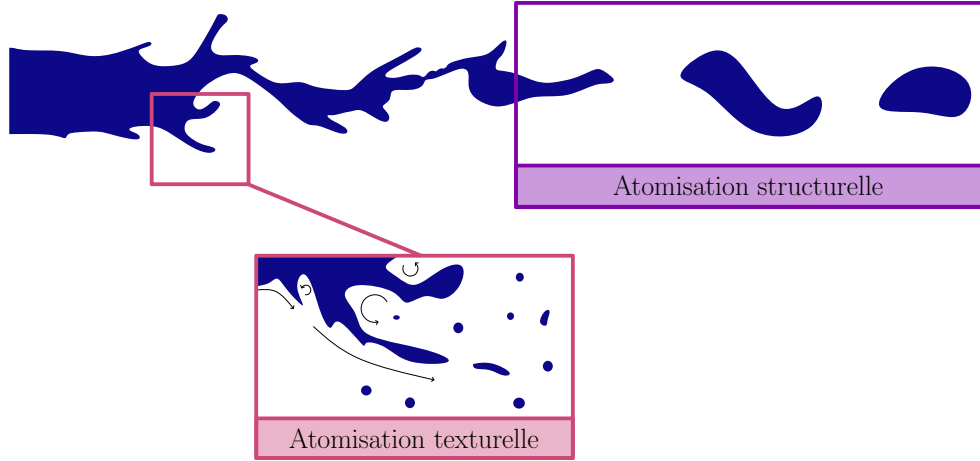


FIGURE 2.7. – Illustration de l'atomisation structurelle et texturale sur un jet coaxial en régime fibre

La décomposition peut être quantifiée par une dimension fractale qui est une mesure de la tortuosité d'une ligne ou d'une surface autosimilaire sur plusieurs échelles, i.e. qui présente des structures similaires à différents niveaux de grossissement ([Grout \*et al.\* \[2007\]](#)). La dimension fractale permet notamment de décrire le processus d'atomisation et en particulier la forme des structures liquides par l'entropie d'échelle ([Dumouchel et Grout \[2009\]](#)). L'analyse multi-échelles est inspirée de ces analyses et a permis de mettre en évidence des distributions de taille de structures liquides issues du processus d'atomisation texturale ([Geiger \*et al.\* \[2023\]](#)).

## 2.2. Déstabilisation du jet liquide en régime fibre

Dans cette section on s'intéresse au processus de déstabilisation du cœur liquide jusqu'à l'atomisation en régime fibre présenté dans la [Section 2.1.2](#). En particulier, on s'intéresse à l'atomisation texturale qui est le principal processus d'atomisation dans ce régime.

### 2.2.1. Développement de la couche de mélange

La phase liquide et la phase gazeuse sont injectées à des vitesses différentes et impliquent donc une discontinuité du profil de vitesse en sortie d'injecteur. Les couches limites des deux fluides, développées dans l'injecteur interagissent, et le liquide, qui a généralement une vitesse plus faible, est progressivement entraîné par le gaz.

Le développement de la couche de mélange d'un fluide de même densité  $\rho$  est représenté sur la [Figure 2.8 \(a\)](#). L'épaisseur de la couche de mélange  $\delta_{\text{vort}}$  peut être définie comme une épaisseur de vorticit   par :

$$\delta_{\text{vort}} = \frac{U_1 - U_2}{(\partial U / \partial y)_{\text{max}}} , \quad (2.10)$$

et son taux d'accroissement  $\delta'_{\text{vort}}$  par :

$$\delta'_{\text{vort}} = \frac{d\delta_{\text{vort}}}{dx}, \quad (2.11)$$

avec  $x$  la coordonnée dans la direction d'injection du fluide. Par des mesures expérimentales, [Brown et Roshko \[1974\]](#) montre que le taux d'accroissement de la couche de mélange peut être relié aux deux vitesses du fluide par :

$$\delta'_{\text{vort}}^{\text{Brw}} = 0.181 \frac{U_1 - U_2}{U_1 + U_2}. \quad (2.12)$$

[Yule \[1972\]](#) trouve une relation légèrement différente, qui se rapproche plus des mesures expérimentales :

$$\delta'_{\text{vort}}^{\text{Yule}} = \frac{U_1 - U_2}{(U_1 + U_2)^{1/2}}. \quad (2.13)$$

Cependant, en atomisation coaxiale, la couche de mélange implique deux fluides de masses volumiques différentes, et donc le développement de deux couches limites d'épaisseur différente, une dans le gaz d'épaisseur  $\delta_g$  et une dans le liquide d'épaisseur  $\delta_l$ , représentées sur la [Figure 2.8](#) (b). Dans ce cas, l'épaisseur de la couche de mélange est donnée par :

$$\delta_{\text{vort}} = \delta_g + \delta_l. \quad (2.14)$$

[Brown \[1974\]](#) puis [Papamoschou et Roshko \[1988\]](#) démontrent qu'en présence de deux fluides de densités différentes, le taux d'accroissement de la couche de mélange  $\delta_{\text{vort}}$  dépend des rapports  $\mathcal{R}_\rho = \rho_l/\rho_g$  et  $\mathcal{R}_U = U_l/U_g$  comme :

$$\delta'_{\text{vort}}^{\text{Pap}} = 0.17 \frac{(1 - \mathcal{R}_U)(1 + \sqrt{\mathcal{R}_\rho})}{1 + \mathcal{R}_U \sqrt{\mathcal{R}_\rho}}. \quad (2.15)$$

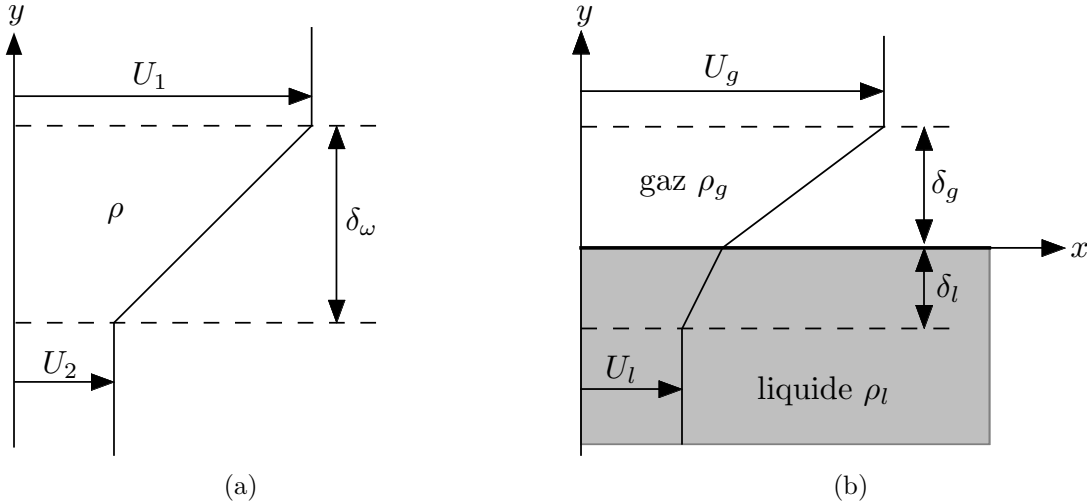


FIGURE 2.8. – Profils de couche de mélange (a) d'un fluide de même densité et (b) de deux fluides de masses volumiques différentes, [Marmottant \[2001\]](#)

### 2.2.2. Apparitions des instabilités interfaciales

Une fois injectée dans la chambre de combustion et en parallèle du développement de la couche de mélange entre le liquide et le gaz, l'interface entre les phases devient instable. Des ondes à la fois longitudinales et transverses parcourent l'interface et croissent au fur et à mesure que le jet progresse dans la chambre. Leur développement est d'autant plus rapide que le différentiel

de vitesse entre le liquide et le gaz est important. Le couplage entre l'instabilité longitudinale et transverse est représenté sur la Figure 2.9 avec leur longueur d'onde respective,  $\lambda_{//}$  et  $\lambda_{\perp}$ .

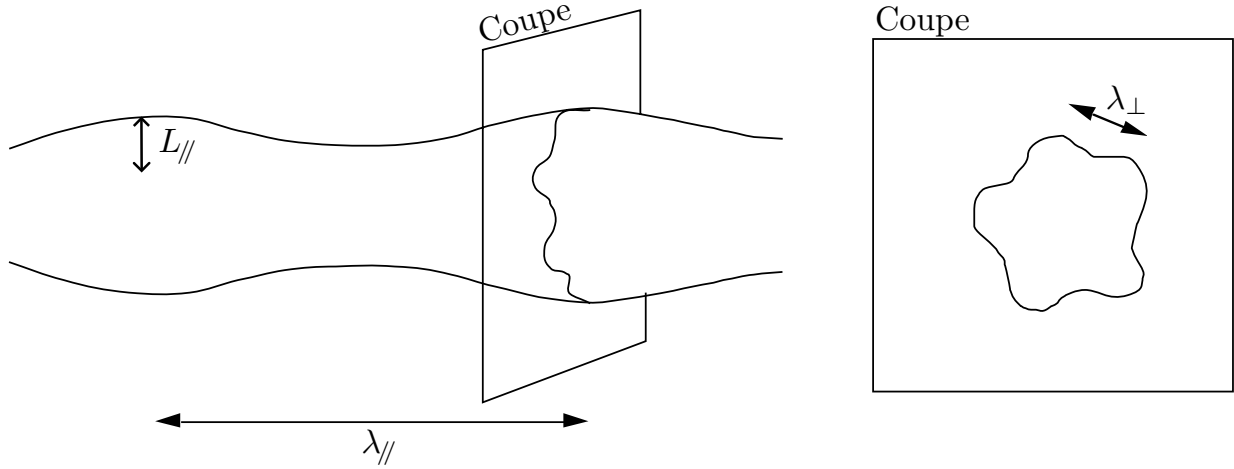


FIGURE 2.9. – Développement de l'instabilité interfaciale longitudinale et transverse sur le cœur liquide, Marmottant [2001]

### 2.2.2.1. Instabilité de cisaillement

Le développement de la couche de mélange d'un fluide homogène (Rayleigh [1879]) ou de deux fluides (Pouliquen *et al.* [1994]) rend le profil de vitesse instable. Dans le cas diphasique l'incidence de la couche limite liquide est négligeable en comparaison à celle de l'air en raison d'une viscosité beaucoup plus élevée ce qui mène à  $\delta_{\text{vort}} = \delta_g$ . En considérant uniquement le développement d'une couche limite côté gaz, Marmottant et Villermaux [2004b] réalisent une analyse de stabilité à la manière de Rayleigh [1879] pour un  $R_\rho$  élevé. L'épaisseur de la couche mélange est mesurée par une épaisseur de vorticit  de mani re identique   l'Equation 2.10 par :

$$\delta_g = \frac{U_{\max} - U_{\min}}{(\partial U / \partial y)_{\max}} = \frac{U_g - U_l}{(\partial U / \partial y)_{\max}}, \quad (2.16)$$

en considérant que le gaz est plus rapide que le liquide. Les auteurs mettent ainsi en  vidence une corrélation entre l'épaisseur de vorticit  et le Reynolds gazeux  $Re_g$  :

$$\delta_g / h_g = 5.6 Re_g^{-1/2}, \quad (2.17)$$

o   $h_g$  est l'épaisseur de l'anneau gazeux. Les mesures expérimentales mettent en  vidence une fréquence caractéristique nommée  $f_{//}$  prenant la forme :

$$f_{//} = \frac{U_{\text{conv}}}{1.4 \delta_g} \left( \frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{1/2}, \quad (2.18)$$

avec  $U_{\text{conv}}$  la vitesse de convection de l'instabilité interfaciale donnée par :

$$U_{\text{conv}} = \frac{U_l \sqrt{\rho_l} + U_g \sqrt{\rho_g}}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_g}}. \quad (2.19)$$

On en déduit la longueur d'onde du phénomène  $\lambda_{//}$  qui est aussi corrélée au rapport des densités et   l'épaisseur de vorticit  :

$$\lambda_{//} = [1.0 - 1.4] \delta_g \left( \frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{1/2}. \quad (2.20)$$

### 2.2.2.2. Instabilité transverse

L'accélération de l'interface liquide/gaz dans la direction longitudinale entraîne l'apparition d'une instabilité transverse. Cette accélération est oscillatoire, dirigée alternativement vers le gaz puis vers le liquide. Comme représentée sur la [Figure 2.10](#), lorsque l'accélération est dirigée vers la phase la plus dense (ici le liquide), elle est instable, c'est le mécanisme de l'instabilité de Rayleigh-Taylor<sup>1</sup>.

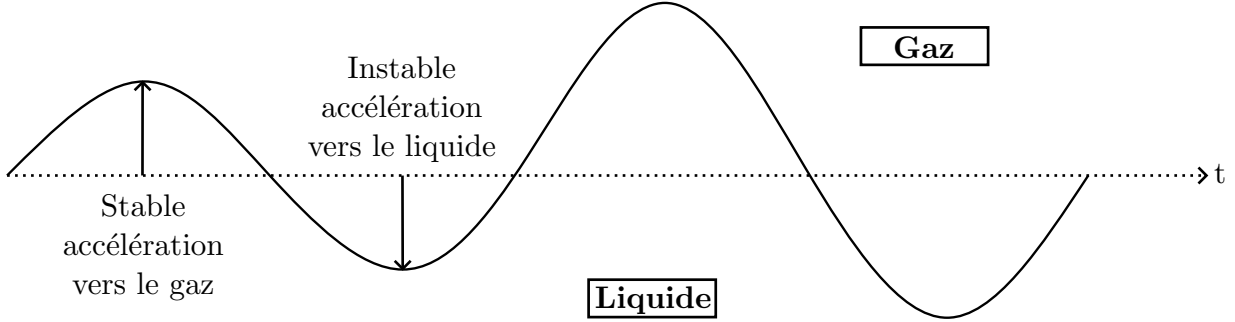


FIGURE 2.10. – Illustration de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sous l'effet d'une accélération transverse

Avec une hypothèse d'interface plane, [Marmottant et Villermaux \[2004b\]](#) identifient une condition sur l'amplitude  $L_{//}$  de l'instabilité longitudinale, repérée sur la [Figure 2.9](#), qui doit être supérieure à une instabilité d'amplitude critique  $a_{cr}$  afin de voir apparaître l'instabilité transverse :

$$L_{//} > L_{//,cr} = 0.5\lambda_{//}We_{\lambda_{//}}^{-1/3}, \quad (2.21)$$

avec :

$$We_{\lambda_{//}} = \frac{\rho_g U_g^2 \lambda_{//}}{\sigma}, \quad (2.22)$$

le Weber défini avec la longueur d'onde longitudinale. Lorsque cette condition est respectée, des instabilités transverses apparaissent avec une longueur d'onde  $\lambda_{\perp}$  :

$$\lambda_{\perp} \simeq 2.46\lambda_{//}We_{\delta_g}^{-1/3}, \quad (2.23)$$

et en utilisant l'Equation 2.20 devient :

$$\lambda_{\perp} \simeq [2.46 - 3.43]\delta_g We_{\delta_g}^{-1/3} \left( \frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{1/3}, \quad (2.24)$$

avec  $We_{\delta_g}$ , le Weber défini avec l'épaisseur de vortacité  $\delta_g$  donné en [Equation 2.16](#) :

$$We_{\delta_g} = \frac{\rho_g U_g^2 \delta_g}{\sigma}. \quad (2.25)$$

A noter que cette corrélation ne fonctionne que pour  $We_{\delta_g} > 3 \times 10^{-3}$  afin que la longueur d'onde transverse soit petite par rapport au diamètre d'injection de la phase liquide et donc du jet liquide, rendant l'hypothèse d'une interface plane valide. De plus, il est important de noter que contrairement à l'instabilité longitudinale, l'instabilité transverse dépend de la tension superficielle  $\sigma$  du liquide dans le gaz.

1. Cette instabilité est rencontrée classiquement comme cas test de code CFD avec deux fluides de densités différentes et un champ de gravité. Cependant il est important de noter qu'un champ de gravité n'est pas nécessaire pour voir l'apparition de ces instabilités, une accélération de l'interface quelconque suffit.

## 2.3. Vers la formation de gouttes

### 2.3.1. Elongation des ligaments

Après la phase de développement des instabilités, un ligament attaché se forme et est progressivement étiré par le co-courant gazeux. Ce phénomène est représenté sur la [Figure 2.11](#) avec  $L_{\text{lig}}$  la longueur du ligament.

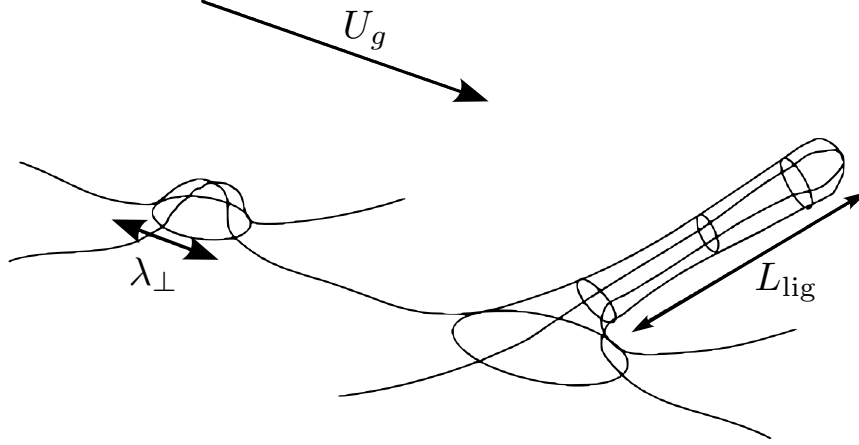


FIGURE 2.11. – Illustration de l'accélération et de l'élongation d'un ligament, [Marmottant \[2001\]](#)

L'étirement du ligament est piloté uniquement par les forces aérodynamiques et [Marmottant et Villermaux \[2004b\]](#) montrent que de sa vitesse  $u_{\text{etir}}$  d'étirement vérifie :

$$\frac{du_{\text{etir}}}{dt} \sim \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l \lambda_{\perp}} \quad (2.26)$$

Si le temps caractéristique d'élongation du ligament  $t_{\text{lig}} = (d \ln L/dt)^{-1}$  est petit devant le temps capillaire  $t_{\sigma} = (\rho_l \lambda_{\perp}^3 / \sigma)^{1/2}$ , alors le ligament conserve son volume  $V_{\text{lig},0} = \pi d_{\text{lig},0}^3 / 6$  ([Marmottant et Villermaux \[2004a\]](#)) lors de son étirement par le co-courant gazeux avec  $d_{\text{lig},0}$  le diamètre de la sphère équivalente donné par :

$$\langle d_{\text{lig},0} \rangle \simeq 0.23 \lambda_{\perp} \quad (2.27)$$

### 2.3.2. Brisure des ligaments en gouttes

Au fur et à mesure de son élongation à volume constant, le ligament s'amincit jusqu'à se briser. La [Figure 2.12](#) est une double exposition d'un jet liquide expérimental, issue de [Marmottant et Villermaux \[2004b\]](#), où la brisure d'un ligament est observée. Une première observation est qu'un seul ligament est à l'origine de plusieurs gouttes de tailles variées. De plus, la taille des gouttes générées est très largement supérieure à l'épaisseur du ligament au moment de la brisure.

À partir d'une étude statistique sur la brisure de ligaments, [Marmottant et Villermaux \[2004a\]](#) et [Villermaux \*et al.\* \[2004\]](#) montrent que la distribution de tailles de gouttes  $d$  issues d'un même ligament  $p_b$  prend la forme d'une fonction gamma :

$$p_b(d/d_{\text{lig},0}) = \frac{n^n}{\Gamma(n)} (d/d_{\text{lig},0})^{n-1} e^{-n d/d_{\text{lig},0}} \quad (2.28)$$

avec  $\Gamma(n) = \int_0^{\infty} t^{n-1} e^{-t} dt$  et  $n = 3.5$  en moyenne ([Marmottant et Villermaux \[2004b\]](#)). Les auteurs mettent ainsi en évidence une taille moyenne de goutte par ligament donnée par :

$$d \approx 0.4 d_{\text{lig},0} \quad (2.29)$$

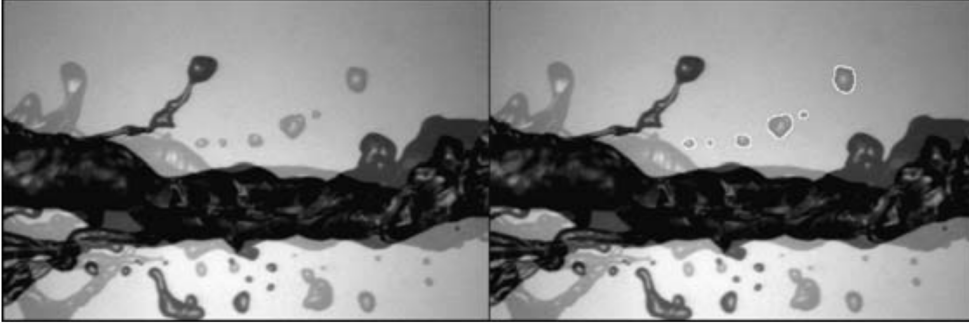


FIGURE 2.12. – Double exposition d'un ligament avant et après sa brisure avec identification des structures liquides atomisées résultantes, Marmottant et Villermaux [2004b]

### 2.3.3. Fragmentation secondaire

Une fois séparées du cœur liquide, les structures liquides se retrouvent dans un environnement gazeux pouvant de nouveau mener à leur rupture, c'est la fragmentation secondaire. Ce processus a été décrit pour des gouttes isolées par Pilch et Erdman [1987] comme dépendant d'un nombre de Weber :

$$\text{We}_{\text{frag}} = \frac{\rho_g (u_g - u_l)^2 d_l}{\sigma}, \quad (2.30)$$

avec  $u_g$  la vitesse perçue par la goutte,  $u_l$  sa vitesse propre et  $d_l$  son diamètre. Cinq mécanismes de fragmentation sont observés et illustrés sur la Figure 2.13 :

- $\text{We}_{\text{frag}} \leq 12$  : *Vibrational breakup*, caractérisé par le développement d'oscillations entrant en résonance avec la goutte. En pratique ce régime est rencontré uniquement sur des configurations de laboratoire dédiées car ayant un temps caractéristique trop long.
- $12 < \text{We}_{\text{frag}} \leq 50$  : *Bag breakup*. La goutte se déforme en un tore auquel est attaché une fine pellicule de liquide se gonflant avec le jet gazeux. La fine pellicule peut finir par exploser, générant des gouttes de très petite taille, puis un peu plus tard potentiellement le tore résultant de la structure initiale en plusieurs gouttes de tailles variées.
- $50 < \text{We}_{\text{frag}} \leq 100$  : *Bag-and-stamen breakup* est un régime transitoire avec des propriétés proches de celui du *Bag breakup*, à l'exception d'une colonne de liquide se formant sur l'axe du tore.
- $100 < \text{We}_{\text{frag}} \leq 350$  : *Sheet stripping*. Dans ce régime, il n'y a plus de formation de poche de liquide, mais une fine pellicule de liquide se forme sur la périphérie de la goutte se faisant continuellement atomisée par le gaz. Une goutte résiduelle est ainsi présente pendant tout le processus de fragmentation.
- $350 < \text{We}_{\text{frag}}$  : *Wave crest stripping*. Une fois le Weber suffisamment élevé, les instabilités à l'origine de la fine pellicule pénètrent la goutte, la brisant en plusieurs gouttes de plus petites tailles. Puis, les gouttes filles peuvent elles aussi subir le même sort jusqu'à ce que leur nombre de Weber les fasse changer de régime, c'est le *Catastrophic breakup*.

Une structure liquide se fragmente ainsi en suivant les régimes précédemment décrits jusqu'à ce qu'il y ait équilibre entre les forces aérodynamiques et la tension de surface. Cet état est caractérisé par un Weber d'équilibre ou critique  $\text{We}_{\text{cr}}$  dont Brodkey et Talbot [1969] montrent qu'il est corrélé avec le nombre d'Ohnesorge, défini dans l'Equation 2.6, en prenant  $d_l$  le diamètre de la goutte comme dimension caractéristique :

$$\text{We}_{\text{cr}} = 12 (1 + 1.077\text{Oh})^{1.6}. \quad (2.31)$$

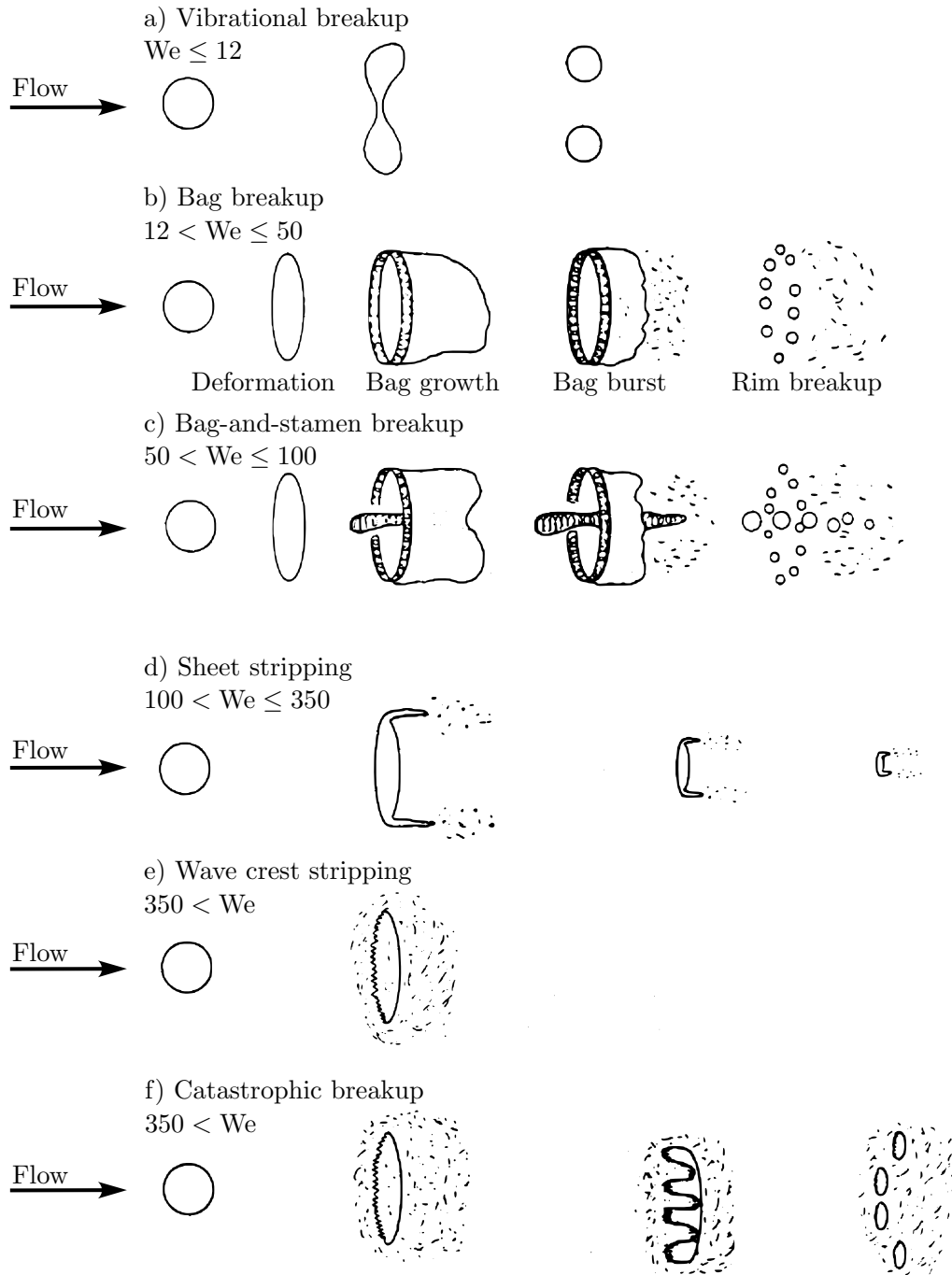


FIGURE 2.13. – Mécanismes de fragmentation d'une goutte isolée, Pilch et Erdman [1987]

### 2.3.3.1. Temps caractéristiques

Le processus de fragmentation implique plusieurs échelles de temps, qui ont été décrites par Pilch et Erdman [1987]. De manière identique à l'Equation 2.18, un temps caractéristique  $\mathcal{T}^*$  de rupture de goutte par les instabilités de Rayleigh-Taylor ou Kelvin-Helmholtz est donné par :

$$\mathcal{T}^* = \frac{\|u_g - u_l\|}{d_l} \left( \frac{\rho}{\rho_l} \right)^{1/2} . \quad (2.32)$$

avec  $\rho$  la masse volumique locale de l'écoulement et égale à  $\rho_g$  dans la phase gazeuse.

### Initialisation de rupture



A partir de ce temps caractéristique, un premier temps "d'initialisation de rupture"  $\mathcal{T}_{\text{init}}$  est déterminé. Sa définition dépend du régime de fragmentation et correspond à la phase de déformation initiale de la goutte. [Pilch et Erdman \[1987\]](#) donnent ainsi une relation empirique dépendante du We et du Oh comme suit :

$$\mathcal{T}_{\text{init}}/\mathcal{T}^* = 1.9 (\text{We} - 12)^{-0.25} \left(1 + 2.2\text{Oh}^{1.6}\right) . \quad (2.33)$$

### Première fragmentation

Le temps pour que la goutte initiale n'existe plus  $\mathcal{T}_{\text{frag}}$  est donné uniquement pour un  $\text{We} > 350$  par manque de données expérimentales disponibles :

$$\mathcal{T}_{\text{frag}}/\mathcal{T}^* = 1.25 . \quad (2.34)$$

Le temps de la première fragmentation ou *primary breakup* est confondu au temps de fragmentation total pour le régime de bag breakup car le tore résiduel peut être considéré comme une structure cohérente correspondant à la goutte initiale.

### Temps de fragmentation total

Enfin, le temps de fragmentation total est défini comme le temps à partir duquel la goutte initiale et tous ses fragments ne subissent plus de fragmentation supplémentaire, i.e. la goutte et ses fragments ont tous atteint leur Weber d'équilibre. Avec une hypothèse de viscosité faible pour la phase liquide ( $\text{Oh} < 0.1$ ), la corrélation donnée par [Pilch et Erdman \[1987\]](#) dépend alors du nombre de Weber et est donnée par :

$$\mathcal{T}_{\text{tot frag}}/\mathcal{T}^* = \begin{cases} 0 & \text{si} & \text{We} \leq 12 , \\ 6 (\text{We} - 12)^{-0.25} & \text{si} & 12 < \text{We} \leq 18 , \\ 2.45 (\text{We} - 12)^{0.25} & \text{si} & 18 < \text{We} \leq 45 , \\ 14.1 (\text{We} - 12)^{-0.25} & \text{si} & 45 < \text{We} \leq 350 , \\ 0.766 (\text{We} - 12)^{0.25} & \text{si} & 350 < \text{We} \leq 2670 , \\ 5.5 & \text{sinon} . \end{cases} \quad (2.35)$$

#### 2.3.3.2. Taille de goutte à l'équilibre

Après le processus de fragmentation, les structures liquides résultantes sont à l'équilibre et on classiquement une taille donnée par :

$$d_{\text{cr}} = \text{We}_{\text{cr}} \frac{\sigma}{\rho \|u_g - u_l\|^2} , \quad (2.36)$$

dépendant du  $\text{We}_{\text{cr}}$  caractérisant cet état d'équilibre. Cependant [Pilch et Erdman \[1987\]](#) montrent que le nombre de Weber d'une structure liquide diminue par deux processus :

- La fragmentation détaillée dans cette section, qui produit des structures liquides de plus petite taille.
- L'accélération des fragments qui diminue le différentiel de vitesse entre le gaz et le liquide .

A partir de ces observations les auteurs définissent un terme supplémentaire à l'Equation 2.36 qui devient :

$$d_{\text{cr}} = \text{We}_{\text{cr}} \frac{\sigma}{\rho \|u_g - u_l\|^2} \left(1 - \frac{u_{\text{frag}}}{\|u_g - u_l\|}\right)^{-2} , \quad (2.37)$$

avec  $u_{\text{frag}}$  la vitesse des fragments à l'instant de leur séparation de la structure liquide mère. Cette formulation a montré une bien meilleure corrélation avec les résultats expérimentaux de taille de gouttes à l'équilibre.

## 2.4. Grandeurs macroscopiques de l'atomisation assistée

Cette section a pour objectif de donner quelques variables caractérisant un jet atomisé par un co-courant gazeux qui sont notamment importantes lors du dimensionnement d'une chambre de combustion d'un moteur fusée à ergols liquides.

### Longueur de cœur liquide

La longueur de cœur liquide peut être définie de plusieurs manières. La plus retenue dans la littérature a été donnée par [Reitz et Bracco \[1986\]](#) qui considèrent cette grandeur correspond à la longueur de la structure liquide attachée à l'injecteur se faisant atomiser par le co-courant gazeux. Cette grandeur est de première importance pour le dimensionnement d'une chambre de combustion car elle vient donner indirectement une idée de la taille de la flamme qui va entourer le liquide et donc impacter directement l'échange thermique entre la flamme et les parois. Plusieurs auteurs ont tenté de donner une corrélation entre la longueur de cœur liquide et les principaux nombres adimensionnels d'un écoulement coaxial défini dans la [Section 2.1.1](#). Par une étude expérimentale d'images ombroscopiques instantanées, [Eroglu et al. \[1991\]](#) mesurent la moyenne des longueurs de cœur liquide instantanées  $L_{\text{inst}}$  et montrent une corrélation dépendante du diamètre de l'injecteur liquide  $D_l$ , du  $We^2$  et du  $Re_l$  :

$$\frac{\overline{L_{\text{inst}}^{\text{Er}}}}{D_l} = 0.66We^{-0.4}Re_l^{0.6} . \quad (2.38)$$

Une autre manière d'estimer la longueur de cœur liquide est de se baser sur des champs moyens. [Villiermaux \[1998\]](#) donne ainsi la définition de la longueur de cœur liquide potentiel caractérisée par la probabilité de présence du liquide. En injectant un colorant dans le liquide et en mesurant sa concentration locale sur le champ de concentration moyen, on peut estimer à quelle probabilité le cœur liquide se trouve à une position donnée. Ainsi, deux corrélations basées uniquement sur le rapport de quantité de mouvement  $J$  sont définies :

$$\frac{\overline{L_{1.0}^{\text{Lash}}}}{D_l} = 6J^{-1/2} , \quad (2.39)$$

avec  $\overline{L_{1.0}}$  la longueur de cœur liquide moyen avec une probabilité de 1.0. [Lasheras et al. \[1998\]](#) trouvent d'ailleurs la même relation théorique avec l'hypothèse d'un jet liquide moyen conique. De plus, on peut définir de la même manière :

$$\frac{\overline{L_{0.5}^{\text{Lash}}}}{D_l} = 12J^{-1/2} , \quad (2.40)$$

avec  $\overline{L_{0.5}}$  la longueur de cœur liquide moyenne avec une probabilité de 0.5. De manière identique, [Leroux et al. \[2007\]](#) déterminent une corrélation similaire, donnée par :

$$\frac{\overline{L_{1.0}^{\text{Ler}}}}{D_l} = 10J^{-0.3} . \quad (2.41)$$

Dans le cadre de la validation du code CEDRE ([Section 3.2.4](#)), [Le Touze \[2015\]](#) et [Rutard \[2019\]](#) ont montré un bon accord de ces corrélations sur des expériences numériques de jet coaxial.

---

2. La définition du Weber donnée par [Eroglu et al. \[1991\]](#) étant basée sur le rayon de l'injecteur liquide et non le diamètre, le coefficient de la corrélation est ici 0.66 et non 0.5.

## Angle du spray

L'angle du spray est défini comme l'angle maximal formé entre l'axe d'injection et les gouttes atomisées. Cette grandeur caractérise l'ouverture du jet et donc de la flamme l'entourant. Tout comme la longueur de cœur liquide, c'est un paramètre majeur pour le dimensionnement d'une chambre de combustion, et en particulier par rapport aux échanges thermiques entre le fluide à très haute température et les parois de la chambre de combustion. [Villermaux \[1998\]](#) montre par une analyse théorique que l'angle de spray  $\theta$  est relié au rapport des flux de quantité de mouvement  $J$  par :

$$\overline{\theta^{\text{Vill}}} = \frac{\pi}{4} - \arctan\left(\frac{\mathcal{J}^{1/2}}{6}\right). \quad (2.42)$$

Dans des travaux plus récents, [Leroux et al. \[2007\]](#) établissent une autre corrélation expérimentale fonction de  $\mathcal{J}$  mais d'évolution opposée à celle de [Villermaux \[1998\]](#) à partir d'une corrélation de la longueur de cœur liquide  $L_{\text{cœur}}$  donnée par l'[Equation 2.41](#) :

$$\overline{\theta^{\text{Ler}}} = 2 \arctan\left(3.3 \frac{D_l}{L_{\text{cœur}}}\right) = 2 \arctan\left(\frac{\mathcal{J}^{0.3}}{3}\right). \quad (2.43)$$

Enfin, par une analyse de stabilité [Leroux et al. \[2007\]](#) aboutissent à la même conclusion que [Marmottant et Villermaux \[2004b\]](#), sur la bonne prédiction de l'analyse de Rayleigh pour le régime fibre et donnent une autre estimation de l'angle du spray  $\theta^{\text{Ray}}$  par :

$$\overline{\theta^{\text{Ray}}} = 2 \arctan\left(\frac{0.72\sqrt{\mathcal{J}}(1 - 0.1\sqrt{\mathcal{J}})}{0.06\mathcal{J} + \sqrt{\mathcal{J}} + 1}\right). \quad (2.44)$$

Malgré cette contradiction, pour  $\mathcal{J} = 10$ , représentant généralement les conditions rencontrées dans un moteur fusée à ergols liquides, on a  $\overline{\theta^{\text{Vill}}} \approx \overline{\theta^{\text{Ler}}} \approx 30^\circ$ . [Rutard \[2019\]](#) a trouvé des valeurs similaires sur un cas expérimental de [Ficuciello et al. \[2017\]](#).

## Bilan

Ce chapitre a permis de faire une synthèse bibliographique théorique et expérimentale du phénomène d'atomisation assistée rencontré lors de l'injection de carburant dans un moteur fusée à ergols liquides. Dans un premier temps, les principaux nombres adimensionnels de l'atomisation assistée ont été présentés ainsi que les régimes qu'ils engendrent. L'analyse fractale de l'écoulement a mis en évidence deux atomisations, l'une structurelle et l'autre texturelle, caractérisées par des échelles différentes. Le second processus, qui produit les plus petites structures liquides en régime fibre, a été analysé en détail car il est l'objet de cette thèse. Le cœur liquide est tout d'abord déstabilisé par le co-courant gazeux, passant par le développement de la couche mélange diphasique à l'apparition d'instabilités interfaciales de cisaillement et transverses. Ces instabilités mènent à la formation de ligaments qui se brisent en des structures de tailles variées. Par la suite, les structures atomisées peuvent de nouveau se fragmenter si le Weber est suffisant jusqu'à se stabiliser lorsque le Weber redescend en dessous d'une valeur critique. Enfin, des grandeurs macroscopiques de l'atomisation importantes pour la caractérisation du jet ont été décrites avec les principales corrélations issues de la littérature.

# Simulation des écoulements diphasiques

L'objectif de ce chapitre est d'introduire les méthodes numériques capables d'aborder la simulation des écoulements présentés dans le [Chapitre 2](#). Pour traiter cet aspect, ce chapitre est séparé en 3 parties distinctes.

La première est consacrée aux équations de Navier–Stokes monophasiques et aux manières de traiter un écoulement turbulent. En particulier, le filtrage des équations de Navier–Stokes ainsi que les modèles associés aux méthodes RANS et LES sont introduites.

Dans un second temps, les équations de Navier–Stokes sont étendues aux écoulements diphasiques. Les méthodes mono-fluides à interface reconstruite, les méthodes à interface diffuse, les méthodes à phase dispersée et enfin les méthodes couplées sont présentées.

Pour finir, une attention particulière sera portée sur les méthodes employées dans les codes DyJeAT et CEDRE, les outils qui ont produits les résultats présentés dans ce manuscrit.

## Sommaire

<b>3.1. Equations de Navier-Stokes monophasiques</b>	<b>26</b>
3.1.1. Simulation Numérique Directe	27
3.1.2. Filtrage des équations	28
3.1.2.1. Reynolds-Averaged Navier-Stokes	30
3.1.2.2. Simulation aux grandes échelles	32
<b>3.2. Écoulements diphasiques</b>	<b>32</b>
3.2.1. Méthodes à un fluide avec reconstruction d'interface	34
3.2.1.1. Suivi d'interface	34
3.2.1.2. Méthodes à capture d'interface	34
3.2.1.3. Code DyJeAT	38
3.2.2. Méthodes multi-fluides à interface diffuse	42
3.2.2.1. Modèle général	42
3.2.2.2. Relaxation du modèle de Baer-Nunziato	43
3.2.2.3. Solveur CHARME de CEDRE	44
3.2.3. Phase dispersée cinétique	49
3.2.3.1. Méthode full spray	50
3.2.3.2. Méthodes lagrangiennes	50
3.2.3.3. Méthodes eulériennes	52
3.2.3.4. Interaction avec la phase porteuse	55
3.2.4. Approche multi-échelles	58
3.2.4.1. Modélisation de l'atomisation primaire	62
3.2.4.2. Pseudo-coalescence	64
<b>3.3. Bilan sur les codes disponibles</b>	<b>65</b>

Après avoir mis en évidence la complexité des écoulements rencontrés dans les moteurs fusées à ergols liquides, et les corrélations pour estimer la longueur de cœur liquide, l'angle d'ouverture du jet et la taille des gouttes atomisées, il apparaît qu'elles ne fournissent qu'une valeur moyenne pour l'ensemble de l'écoulement et ont un domaine de validité généralement limité. La recherche de lois mathématiques décrivant la dynamique des écoulements est donc très vite apparue comme un moyen de caractériser l'ensemble des variables le régissant.

Dès 1757 le physicien L.Euler développe les équations décrivant l'écoulement des fluides dans un milieu continu et un référentiel dit eulérien où l'écoulement est suivi depuis une position fixe. Cette vision s'oppose au référentiel lagrangien où les particules fluides sont suivies le long de leur trajectoire. Ainsi, dans un référentiel eulérien, un fluide est décrit par une équation de continuité garantissant la conservation de la masse du fluide :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 , \quad (3.1)$$

avec  $\rho$ , la masse volumique et  $u$  le vecteur vitesse du fluide. Une seconde équation sur la quantité de mouvement, découlant du principe fondamental de la dynamique appliqué au système fluide donne :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla p + \rho f , \quad (3.2)$$

avec  $p$  la pression et  $f$  l'ensemble des forces extérieures s'exerçant sur le système (par exemple la gravité). Enfin, une dernière équation décrit le conservation de l'énergie du système :

$$\frac{\partial \rho e_{\text{tot}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_{\text{tot}} u) = -\nabla \cdot (p u) + \rho f \cdot u , \quad (3.3)$$

avec  $e_{\text{tot}}$  l'énergie totale, somme de l'énergie interne et de l'énergie cinétique du fluide.

### 3.1. Equations de Navier-Stokes monophasiques

Les équations de Navier-Stokes sont une extension des équations d'Euler prenant en compte la viscosité du fluide et des sources de chaleur dans l'équation d'énergie. Les équations instantanées 3.1, 3.2 et 3.3 sont augmentés par les termes suivants :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) &= 0 , \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) &= \nabla \cdot (\tau - pI) + \rho f , \\ \frac{\partial \rho e_{\text{tot}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_{\text{tot}} u) &= \nabla \cdot ((\tau - pI) u - J_{e_{\text{tot}}}) + \rho f \cdot u , \end{aligned} \quad (3.4)$$

avec  $I$  la matrice identité,  $\tau$  le tenseur des contraintes visqueuses et  $J_{e_{\text{tot}}}$  le flux d'énergie total. Ce dernier terme caractérise des échanges de chaleur, généralement exercés sur les conditions aux limites par conduction ou bien issus d'un rayonnement extérieur et s'exerçant dans tout le domaine. Dans la plupart des applications aérospatiales, le nombre de Reynolds (Equation 2.1 ou Equation 2.2) est suffisamment élevé pour rendre l'écoulement turbulent. La turbulence est un phénomène très instationnaire, fortement multi-échelles, tri-dimensionnel, qui rend sa résolution extrêmement complexe. Ce phénomène particulier nécessite d'être décrit de manière précise car il pilote l'évolution de l'écoulement. La simulation de la turbulence peut engendrer une augmentation très importante du coût de calcul. En conséquence, la turbulence est l'objet de différentes modélisations qui seront décrites dans la suite de cette section.

Le [Paragraphe 2.1.1](#) a mis en évidence une grande variété d'échelles tourbillonnaires qu'il faut caractériser. Les grandes échelles tourbillonnaires ont une taille  $l$ , une vitesse  $v_{\text{ge}}(l)$  et donc un temps caractéristique dit de retournement  $\mathcal{T}_{\text{ret}} \approx l/v_{\text{ge}}(l)$ . Cela permet d'introduire le concept de diffusivité turbulente  $\nu_{\text{turb}}$ , grandeur dépendante des grandes échelles de l'écoulement par une analyse dimensionnelle :

$$\nu_{\text{turb}} \approx \frac{l^2}{\mathcal{T}_{\text{ret}}} \approx v_{\text{ge}} l . \quad (3.5)$$

Enfin, on peut définir le nombre de Reynolds des grandes échelles tourbillonnaires  $\text{Re}_{\text{turb}}$  donné par :

$$\text{Re}_{\text{turb}} = \frac{v_{\text{ge}} l}{\nu} = \frac{\nu_{\text{turb}}}{\nu} \gg 1, \quad (3.6)$$

qui dissipent leur énergie pendant un temps de retournement à un taux :

$$\varepsilon \approx \frac{v_{\text{ge}}^2}{\mathcal{T}_{\text{turb}}}. \quad (3.7)$$

L'énergie des grandes échelles de taille  $l$  est ensuite transférée vers des structures tourbillonnaires de plus en plus petite taille jusqu'à l'échelle de Kolmogorov  $\eta$  de vitesse  $v_{\text{pe}}$  définie par :

$$\text{Re}_{\eta} = \frac{v_{\text{pe}} \eta}{\nu} = 1, \quad (3.8)$$

et un taux de dissipation  $\varepsilon_{\eta}$  :

$$\varepsilon_{\eta} = \nu \left( \frac{v_{\text{pe}}}{\eta} \right)^2. \quad (3.9)$$

Ainsi on peut estimer le lien entre les grandes et les petites échelles en fonction du Reynolds turbulent :

$$\frac{l}{\eta} = \text{Re}_{\text{turb}}^{3/4}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\mathcal{T}_{\text{turb}}}{\mathcal{T}_{\eta}} = \text{Re}_{\text{turb}}^{1/2}, \quad (3.11)$$

$$\frac{v_{\text{ge}}}{v_{\text{pe}}} = \text{Re}_{\text{turb}}^{1/4}, \quad (3.12)$$

avec  $\mathcal{T}_{\eta}$  le temps de retournement des tourbillons de taille  $\eta$ . Ces relations mettent notamment en évidence le fait que plus le nombre de Reynolds est élevé, plus la séparation d'échelles est importante, ce qui a un impact direct sur le coût de calcul (Section 3.1.1).

Plusieurs approches ont été développées dans la littérature pour pouvoir prendre en compte l'ensemble des échelles de la turbulence représentées sur la Figure 3.1, et seront détaillées dans les sections suivantes. La Simulation Numérique Directe (DNS pour *Direct Numerical Simulation*) consiste à résoudre l'ensemble des échelles de la turbulence jusqu'à l'échelle de Kolmogorov. La seconde approche calcule les grandes échelles tourbillonnaires jusqu'à une échelle de coupure  $1/\kappa$  et modélise les échelles au delà, elle est communément appelée Simulation aux grandes échelles (LES pour *Large Eddy Simulation*). Enfin, la solution extrême consiste à ne calculer aucune échelle et à modéliser l'ensemble du spectre, c'est l'approche RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*).

### 3.1.1. Simulation Numérique Directe

Afin de résoudre toutes les échelles tourbillonnaires de l'écoulement il est admis qu'il faut entre  $n = 3$  (critère de Nyquist) et  $n = 5$  points pour résoudre correctement les plus petites structures. En utilisant l'estimation du rapport entre les grandes et plus petites échelles tourbillonnaires donné par Equation 3.10, le nombre de points  $N$  nécessaire pour une simulation DNS 3D est :

$$N \sim n^3 \text{Re}_{\text{turb}}^{9/4}. \quad (3.13)$$

Par exemple en prenant  $n = 5$  et un écoulement à  $\text{Re}_{\text{turb}} = 3 \times 10^3$ , il est nécessaire d'avoir des maillages de l'ordre de la dizaine de milliards de mailles. De plus, l'Equation 3.11 montre aussi que plus le Reynolds est élevé plus le temps caractéristique des plus petites structures est petit, et donc que pour capter toute la dynamique de ces échelles, le pas de temps de la simulation doit être très petit (de même 3 à 5 fois plus petit que  $\mathcal{T}_{\eta}$  pour respecter le critère de Nyquist).

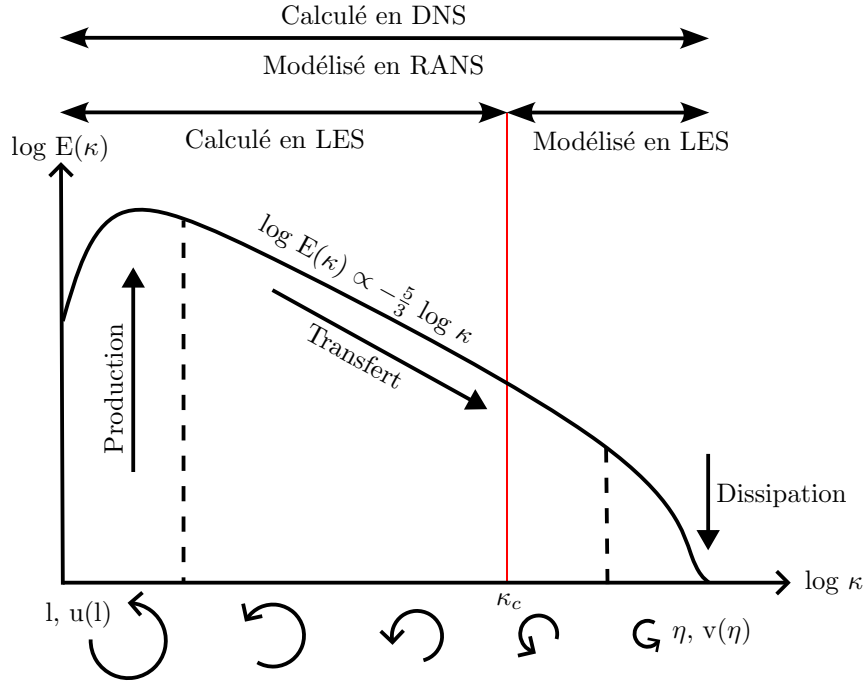


FIGURE 3.1. – Cascade d'énergie turbulente de Kolmogorov et échelles caractéristiques

Tous ces facteurs rendent une telle simulation limitée à des configurations académiques pour des Reynolds faibles.

### 3.1.2. Filtrage des équations

Pour réaliser des simulations de configurations industrielles complexes, il est nécessaire de réduire drastiquement le coût de calcul. La stratégie la plus employée est d'essayer de modéliser au moins une partie des plus petites échelles du spectre de turbulence. Ainsi le maillage nécessaire est considérablement moins important, mais nécessite de filtrer les équations de Navier-Stokes et d'une modélisation adaptée pour les échelles filtrées. La stratégie pour filtrer les équations de Navier-Stokes est de décomposer les variables naturelles du problème en une partie moyenne et une partie fluctuante.

#### Moyenne de Reynolds

Dans un écoulement incompressible, Reynolds introduit la décomposition pour une grandeur du système  $\phi$  :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' , \quad (3.14)$$

avec  $\bar{\phi}$ , la moyenne d'ensemble de la grandeur  $\phi$ , et  $\phi'$  sa fluctuation autour de la moyenne. En prenant la même décomposition, l'équation de conservation de la masse devient :

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 , \quad (3.15)$$

avec  $j$  l'indice de convention de sommation d'Einstein. L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'exprime pour une direction  $i = [x, y, z]$  :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} + \tau_{\text{turb}}) + \bar{f} , \quad (3.16)$$

en prenant l'hypothèse d'un fluide newtonien (ou hypothèse de Stokes),  $\bar{\tau}_{ij}$  le tenseur des contraintes

visqueuses filtré :

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.17)$$

avec  $\mu = \rho\nu$ . Dans l'Equation 3.16,  $\tau_{\text{turb}}$  est le tenseur des contraintes turbulentes égal (en incompressible) au tenseur de Reynolds donné par :

$$\tau_{\text{turb}} = R_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j}. \quad (3.18)$$

Une première remarque est que l'Equation 3.16 est dépendante uniquement de grandeurs moyennes hormis le tenseur de Reynolds. Ce terme est l'unique différence à l'Equation 3.4 de quantité de mouvement et contient donc la modélisation des échelles du spectre de turbulence non résolues. Il met en évidence toute la difficulté à simuler un écoulement turbulent et fait apparaître 6 nouvelles inconnues (le tenseur étant symétrique) qu'il est nécessaire de modéliser. Enfin, de manière générale, l'équation d'énergie n'est pas donnée avec une hypothèse d'incompressibilité car les configurations étudiées n'impliquent pas d'échange de chaleur (qui rendrait l'écoulement potentiellement compressible).

### Moyenne de Favre

Pour un écoulement compressible, la moyenne de Reynolds fait apparaître des termes supplémentaires lors du filtrage. Dans ce contexte, la moyenne de Favre est définie pour simplifier la forme des équations filtrées :

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'', \quad (3.19)$$

avec :

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}}, \quad (3.20)$$

et  $\phi''$  la fluctuation autour de  $\tilde{\phi}$ . En appliquant la moyenne de Favre le système de 3.4 devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}) &= 0, \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \otimes \tilde{u}) &= \nabla \cdot (\tau_{\text{turb}} + \bar{\tau} - \bar{p} \mathbf{I}) + \bar{\rho} \tilde{f}, \\ \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{e}_{\text{tot}} + E^T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{e}_{\text{tot}} + E^T) &= \nabla \cdot ((\bar{\tau} - \bar{p} \mathbf{I}) u - (\overline{J_{e_{\text{tot}}} + J^T})) + \overline{\rho f \cdot u}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

avec dans l'équation d'énergie les grandeurs fluctuantes :

$$E^T = \frac{1}{2} \overline{\rho u''^2}, \quad (3.22)$$

$$J^T = \overline{\rho h''_{\text{turb}} u''} - \overline{\tau u''}, \quad (3.23)$$

et  $h_{\text{turb}} = e_{\text{tot}} + p/\rho$  l'enthalpie totale. L'équation de quantité de mouvement fait apparaître quant à elle d'autres termes que le tenseur de Reynolds dans le tenseur des contraintes turbulentes  $\tau_{\text{turb}}$  qui s'exprime cette fois ci comme :

$$\tau_{\text{turb}} = \underbrace{-\bar{\rho} (\tilde{u}\tilde{u} - \tilde{u}\tilde{u})}_{L_{ij}} \underbrace{-\bar{\rho} (\tilde{u}u'' + u''\tilde{u})}_{C_{ij}} \underbrace{-\bar{\rho} u''u''}_{R_{ij}}, \quad (3.24)$$



avec  $L_{ij}$  le tenseur de Léonard caractérisant les interactions entre les échelles résolues,  $C_{ij}$  le tenseur croisé correspondant aux interactions entre grandes et petites échelles et  $R_{ij}$  le tenseur de Reynolds déjà présenté. Le tenseur croisé nécessiterait une modélisation car il fait intervenir des grandeurs fluctuantes mais en pratique seul les tenseurs de Léonard et de Reynolds sont considérés.

### Hypothèse de Boussinesq

Pour la modélisation du tenseur de Reynolds, et par similitude au tenseur des contraintes visqueuses donné en Equation 3.17, Boussinesq [1877] propose une modélisation par :

$$R_{ij} = \mu_{\text{turb}} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} , \quad (3.25)$$

où  $\mu_{\text{turb}}$  est une viscosité turbulente et  $k = \widetilde{u''u''}/2$  l'énergie cinétique turbulente. Il faut donc modéliser seulement 2 termes,  $\mu_{\text{turb}}$  la viscosité turbulente et  $k$  l'énergie cinétique turbulente au lieu des 6 inconnues précédemment définies. Les prochaines sections présentent les modélisations les plus répandues dans la littérature.

#### 3.1.2.1. Reynolds-Averaged Navier-Stokes

Pour réaliser des simulations de configurations industrielles complexes, la première approche et celle qui est encore très largement utilisée dans l'industrie est la méthode RANS, où toutes les échelles de la turbulence sont modélisées. Il s'agit d'une approche statistique : seuls quelques moments des variables de l'écoulement sont calculés. Cela permet d'obtenir un coût très abordable, ce qui en fait un standard dans l'industrie. De l'autre côté, la grande majorité des phénomènes physiques étudiés sont instationnaires, ce qui réduit l'intérêt de cette approche. Le RANS peut d'ailleurs se révéler peu fiable sur certaines configurations, et la précision de résultats dépend largement de la modélisation choisie. Cette section donne un aperçu des principaux modèles de la littérature pour cette méthode.

#### Modèle $k - \varepsilon$

Le modèle  $k - \varepsilon$  standard développé par Jones et Launder [1972] se base sur l'analyse dimensionnelle de Prandtl et Kolmogorov, qui permet de déterminer la viscosité turbulente comme dépendante de l'énergie cinétique turbulente  $k$  et de son taux de dissipation  $\varepsilon$  :

$$\mu_{\text{turb}} = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} , \quad (3.26)$$

avec  $C_\mu$  une constante adimensionnelle. À partir des équations de contraintes de Reynolds elles mêmes déterminées par les équations moyennes données en 3.21 et celles des fluctuations (données par soustraction des équations filtrées aux équations instantanées), une équation sur l'énergie cinétique turbulente  $k$  et une sur le taux de dissipation  $\varepsilon$  peuvent être obtenus :

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} k) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_{\text{turb}}}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + R_{ij} : \nabla \cdot \tilde{u} - \bar{\rho} \varepsilon , \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \varepsilon) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_{\text{turb}}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon_1} (R_{ij} : \nabla \cdot \tilde{u}) - C_{\varepsilon_2} \bar{\rho} \varepsilon) , \quad (3.28)$$

avec  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$  l'équivalent d'un Prandtl turbulent,  $C_{\varepsilon_1}$ ,  $C_{\varepsilon_2}$  des constantes à déterminer. Les valeurs pratiques de ces constantes, déterminées par des hypothèses d'homogénéité et une évolution temporelle déterminée expérimentalement par une loi  $k \sim t^{-1/(C_{\varepsilon_1}-1)}$  sont données dans le Tableau 3.1.

$C_\mu$	$\sigma_k$	$C_{\varepsilon_1}$	$C_{\varepsilon_2}$	$\sigma_\varepsilon$
0.09	1	1.44	1.92	1.3

 TABLE 3.1. – Valeurs pratiques des coefficients du modèle  $k - \varepsilon$ 

Ce modèle, largement étudié dans la littérature, a montré son efficacité pour simuler des écoulements cisailés à haut Reynolds avec un gradient de pression faible. Plusieurs évolutions ont été apportées, notamment le  $k - \varepsilon$  RNG (Yakhot *et al.* [1992]), développé à partir de la théorie de renormalisation des groupes, cette variante se montre plus précise que le modèle  $k - \varepsilon$  sur une plus grande plage d'écoulements et fournit une formule analytique pour les nombres de Prandtl turbulents. Enfin, on peut aussi noter le modèle  $k - \varepsilon$  de "réalisabilité" développé par Shih *et al.* [1995] apportant une plus grande précision dans les écoulements cisailés ou encore les écoulements avec séparation et recirculations. Cependant, le modèle montre ses limites en proche parois pour  $y^+ = uy/\nu < 30$ .

### Modèle $k - \omega$

Le deuxième modèle le plus répandu est le modèle  $k - \omega$  de Wilcox [1988], basé sur les équations d'énergie cinétique turbulente et de la fréquence caractéristique de la turbulence  $1/\omega = k/\varepsilon$ . Dans ce cas, la viscosité turbulente s'exprime :

$$\mu_{\text{turb}} = C_\mu \frac{k}{\omega}, \quad (3.29)$$

et le système d'équations régissant l'évolution de  $k$  et  $\omega$  devient :

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} k) = \nabla \cdot ((\mu + \sigma^* \mu_{\text{turb}}) \nabla k) + R_{ij} : \nabla \cdot \tilde{u} - \beta^* \bar{\rho} \omega, \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \omega) = \nabla \cdot ((\mu + \sigma \mu_{\text{turb}}) \nabla \omega) + \alpha \frac{\omega}{k} R_{ij} : \nabla \cdot \tilde{u} - \beta \bar{\rho} \omega^2, \quad (3.31)$$

avec  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\beta^*$ ,  $\sigma$  et  $\sigma^*$  des constantes qu'il faut déterminer. Wilcox [2006] donne une estimation de chacun de ces coefficients par des mesures expérimentales. Les valeurs sont résumées dans le Tableau 3.2 et dépendent de deux grandeurs  $f_\beta$  et  $f_\beta^*$  données par :

$$f_\beta = \frac{1 + 85\chi_\omega}{1 + 100\chi_\omega}; \quad \chi = \left| \frac{\overline{\Omega_{ij} \Omega_{jk} S_{ki}}}{(\beta^* \omega)^3} \right|, \quad (3.32)$$

avec :

$$\overline{S_{ij}} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right); \quad \overline{\Omega_{ij}} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.33)$$

$$f_\beta^* = \frac{1 + 85\chi_\omega}{1 + 100\chi_\omega}; \quad \chi = \left| \frac{\overline{\Omega_{ij} \Omega_{jk} S_{ki}}}{(\beta^* \omega)^3} \right|. \quad (3.34)$$

Ce modèle donne des résultats plus précis que le modèle  $k - \varepsilon$  pour des Reynolds faibles et donc en proche parois avec des gradients de pression adverses et des décollements de couche limite.

$\alpha$	$\beta$	$\beta^*$	$\sigma$	$\sigma^*$	$\beta_0$
13/25	$\beta_0 f_\beta$	9/100	0.5	0.6	0.0708

 TABLE 3.2. – Valeurs pratiques des coefficients du modèle  $k - \omega$

Le modèle  $k - \varepsilon$  étant plus performant dans les zones d'écoulement libre à haut Reynolds et le modèle  $k - \omega$  en proche parois, une combinaison de ces deux modèles est proposée par [Menter \[1993\]](#), et nommé  $k - \omega$  SST. La transition entre les modèles est réalisée par une fonction de mélange qui permet de faire la transition entre les modèles  $k - \varepsilon$  et  $k - \omega$ .

### 3.1.2.2. Simulation aux grandes échelles

Dans des écoulements complexes, fortement instationnaires comme ceux rencontrés dans les moteurs fusées, la nature de l'écoulement est dominée par des phénomènes instationnaires, en particulier par des instabilités mono et diphasiques. L'approche RANS devient inadaptée soit pour la difficulté à obtenir des statistiques précises, soit car l'objectif de la simulation est de prédire les oscillations de l'écoulement (fluctuations de pression, concentration de liquide, acoustique, ...).

La simulation aux grandes échelles est basée sur une opération de filtrage spatiale des équations de Navier-Stokes jusqu'à une échelle de coupure  $\kappa$  comme représenté sur la [Figure 3.1](#). Ainsi, toutes les échelles de la turbulence sont résolues jusqu'à cette échelle, tandis que les plus petites sont modélisées. Pour toute variable  $\phi$  on note  $\overline{\phi}$  la partie filtrée, ou résolue, et  $\phi'$  la partie sous-maille, ou non résolue. Le filtre spatial est donné par :

$$\overline{\phi(x)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(r) G_{\kappa}(x - r) dr = G_{\kappa} \star \phi , \quad (3.35)$$

où  $G_{\kappa}$  est le noyau de convolution du filtre à l'échelle de coupure  $1/\kappa$ . La partie sous-maille  $\phi'$  est elle obtenue par un produit de convolution avec le noyau :

$$\phi' = (1 - G_{\kappa}) \star \phi . \quad (3.36)$$

Dans la plupart des cas pratiques, le filtrage n'est pas explicite mais réalisé implicitement par le maillage dont la taille du filtre est donnée par  $1/\kappa = \Delta$  avec  $\Delta$  la taille de maille. En appliquant le filtrage de Reynolds ou de Favre, les équations de Navier-Stokes filtrées sont identiques à celles de la [Section 3.1.2.1](#), à la différence que le tenseur de Reynolds caractérise l'effet des échelles de la turbulence de sous-maille, de l'échelle de coupure  $1/\kappa$  aux échelles de Kolmogorov de taille , sur l'écoulement résolu.

Le dernier terme du tenseur de Reynolds dépendant de l'énergie turbulente  $k$ , donné dans l'[Equation 3.25](#), est généralement négligé en LES ce qui permet de concentrer l'effort de modélisation sur la viscosité turbulente. Le modèle de [Smagorinsky \[1963\]](#) est le plus utilisé dans la littérature et donne la viscosité turbulente  $\mu_{\text{turb}}$  comme dépendante des grandeurs filtrées de l'écoulement :

$$\mu_{\text{turb}} = 2C_S \overline{\rho} l^2 \sqrt{\overline{S_{ij}} \overline{S_{ij}}} , \quad (3.37)$$

avec  $\overline{S_{ij}}$  le tenseur des efforts résolus filtré dont l'expression avait été donnée dans l'[Equation 3.33](#),  $C_S$  une constante du modèle et  $l = \Delta$  dans sa formulation initiale. Par une analyse dimensionnelle Smagorinsky montre que, dans le cas d'une turbulence homogène isotrope,  $C_S \simeq 0.01$ , valeur qui doit être ajustée suivant les écoulements étudiés. De nombreux autres modèles ont été développés pour la LES et décrits en détail par [Sagaut \[2006\]](#) : modèles dynamiques dérivés de celui de Smagorinsky, similarité d'échelles, etc.

## 3.2. Écoulements diphasiques

La simulation des écoulements diphasiques présentée dans le [Chapitre 2](#) nécessite de représenter les forces liées à une interface entre la phase liquide et la phase gazeuse. L'interface est une zone de transition d'épaisseur moléculaire entre les deux phases non miscibles, lieu de génération de forces moléculaires dont le résultat macroscopique est la force de tension de surface. Dans une modélisation de milieu continu, est considérée comme infiniment mince. De plus, les écoulements atomisant étudiés dans cette thèse produisent des structures liquides de tailles très variées qui

peuvent être plus petites que la taille d'une maille nécessaire pour résoudre la turbulence. Cette difficulté est illustrée sur la [Figure 3.2](#) avec un écoulement d'un jet coaxial LOx/GH<sub>2</sub> issu du banc Mascotte ([Fdida et al. \[2019\]](#)). Dans les conditions de l'étude, et de manière plus générale dans le régime fibre, le cœur liquide peut atteindre des longueurs de l'ordre de la dizaine de millimètres alors que les plus petites gouttes peuvent avoir un diamètre de quelques microns.

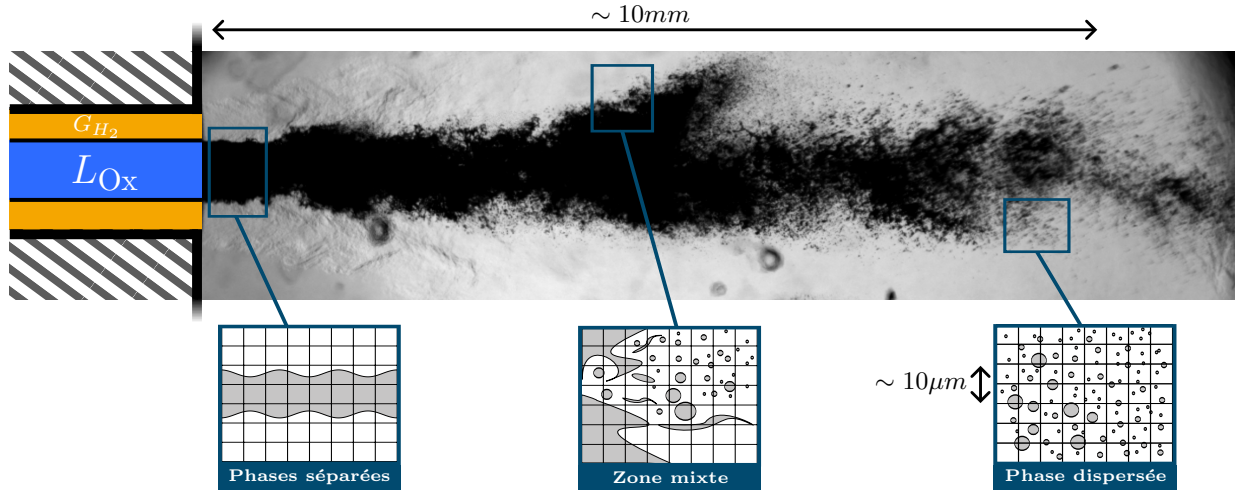


FIGURE 3.2. – Jet LOx dans une flamme, rencontré dans un moteur fusée du banc Mascotte ([Fdida et al. \[2019\]](#)) avec l'identification des phases séparées, de la zone mixte et de la phase dispersée

Cette section a pour objectif de donner une vue d'ensemble des méthodes disponibles pour simuler ces écoulements, en se concentrant sur celles utilisées dans cette thèse. On peut distinguer trois approches pour traiter des écoulements diphasiques :

- Eulériennes regroupant plusieurs méthodes. Une première manière est de considérer un ou plusieurs fluides et de donner des propriétés spécifiques aux cellules contenant une interface par une fonction indicatrice. La seconde manière consiste à décrire une phase comme un ensemble de structures sphériques par une approche cinétique eulérienne évoluant dans une phase elle aussi décrite par une approche eulérienne (par exemple des gouttes dans un environnement gazeux ou des bulles dans une liquide). L'ensemble de ces méthodes seront détaillées par la suite dans la [Section 3.2.1.2](#), [Section 3.2.2](#) et la [Section 3.2.3.3](#).
- Lagrangienne : Chacun des fluides est représenté par un ensemble de particules dirigées par une équation de la dynamique prenant en compte des forces d'interactions ou à distance que l'on retrouve dans les formulations eulériennes (pression, viscosité, gravité, ...).
- Mixtes eulérienne/lagrangienne qui peuvent être décomposées en deux catégories. Dans la première, les fluides suivent une approche eulérienne et un maillage mobile suit le mouvement de l'interface diphasique ([Section 3.2.1.1](#)). La seconde, consiste à considérer un ensemble de particules lagrangiennes porté par une autre phase décrite dans un formalisme eulérien. Ces méthodes seront détaillées dans la [Section 3.2.3.2](#).

La méthode lagrangienne est principalement utilisée en SPH (*Smooth Particle Hydrodynamics*) pour des grandes déformations de structures solides (simulations astrophysiques, rupture de matériau, etc.) mais n'est généralement pas adaptée à des écoulements turbulents de par les différences d'échelles mises en jeu et ne sera donc pas détaillée dans cette thèse. La suite de cette section se concentre sur les méthodes eulériennes et les méthodes mixtes pour la simulation d'un spray atomisant.

### 3.2.1. Méthodes à un fluide avec reconstruction d'interface

#### 3.2.1.1. Suivi d'interface

Le principe de la méthode introduite par Glimm [1991] est d'utiliser un maillage au formalisme eulérien où sont résolues les équations de Navier-Stokes monophasiques classiques et un maillage lagrangien qui va permettre de suivre l'interface entre les deux phases au cours du temps. L'interface est représentée par des marqueurs illustrés sur la Figure 3.3 reliés par des droites ou des splines selon les approches, rendant le calcul de la tension de surface direct par intégration de la force sur la courbe de l'interface. Les propriétés des fluides sont définies par une fonction indicatrice reposant sur la normale à l'interface.

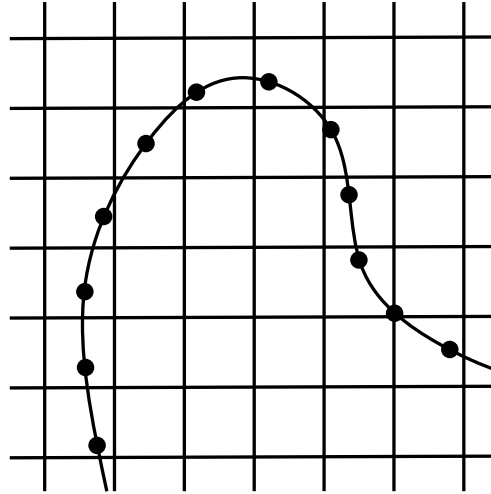


FIGURE 3.3. – Principe de la méthode de suivi d'interface avec représentation des marqueurs lagrangiens

En pratique, la méthode est très coûteuse pour des applications 3D car elle nécessite de maintenir une distribution de marqueurs uniforme sur les structures liquides tout au long du calcul. De plus, les phénomènes de rupture ou de coalescence de l'interface nécessitent d'être modélisés car ne sont pas intrinsèques à la méthode ce qui rend cette méthode inadaptée aux écoulements étudiés dans cette thèse.

#### 3.2.1.2. Méthodes à capture d'interface

L'ensemble de ces méthodes considère un seul fluide où les propriétés locales de l'écoulement (masse volumique, viscosité) dépendent du positionnement de la cellule par rapport à l'interface. Pour cela, on reconstruit l'interface au sein de chaque cellule, ce qui nécessite des schémas numériques d'ordre élevé et des maillages suffisamment fins pour capter les plissements de l'interface entre les deux phases.

#### Volume of Fluid

La méthode *Volume of Fluid* (VoF) utilise le transport d'un scalaire  $C$  afin de représenter l'interface. On définit la fonction  $C$  telle que : lorsqu'une cellule est entièrement remplie de liquide  $C = 1$ , à l'inverse  $C = 0$  si elle contient uniquement du gaz et  $0 < C < 1$  sur l'interface. La fonction couleur VoF est régie par l'équation de transport à la vitesse de l'écoulement  $u$  :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \nabla C = 0 . \quad (3.38)$$

En l'état, la résolution numérique de l'Equation 3.38 introduit inévitablement de la diffusion artificielle créant ainsi une zone de mélange artificielle où  $C$  passe de 0 à 1 et diffusant ainsi l'interface sur plusieurs cellules. Deux solutions peuvent être envisagées pour éviter ce phénomène :

- Utiliser des schémas numériques les moins diffusifs possibles (notamment en augmentant l'ordre du schéma) ainsi que des limiteurs compressifs de l'interface (abordé dans la Section 3.2.4).
- Garantir que l'interface soit localisée sur une seule cellule par reconstruction de l'interface au sein de la cellule pour estimer les flux de VoF.

Dans la suite de cette section on se concentre sur les méthodes à reconstruction d'interface. L'ensemble des méthodes disponibles dans la littérature est représenté sur la Figure 3.4. La première à avoir été développée par Noh et P. [1976] est la méthode SLIC (*Simple Line Interface Calculation*) qui permet de reconstruire l'interface sous forme d'un plan horizontal ou vertical. La méthode la plus répandue est la méthode PLIC (*Piecewise Linear Interface Calculation*) de Youngs [1982] qui se distingue par une représentation de l'interface par des plans "inclinés". Enfin, Renardy et Renardy [2002] proposent une reconstruction parabolique PROST (*Parabolic Reconstruction Of Surface Tension*) de l'interface qui offre une plus grande précision. Cette méthode a été étendue à des maillages non structurés par Evrard *et al.* [2017] mais engendre des coûts de calcul importants.

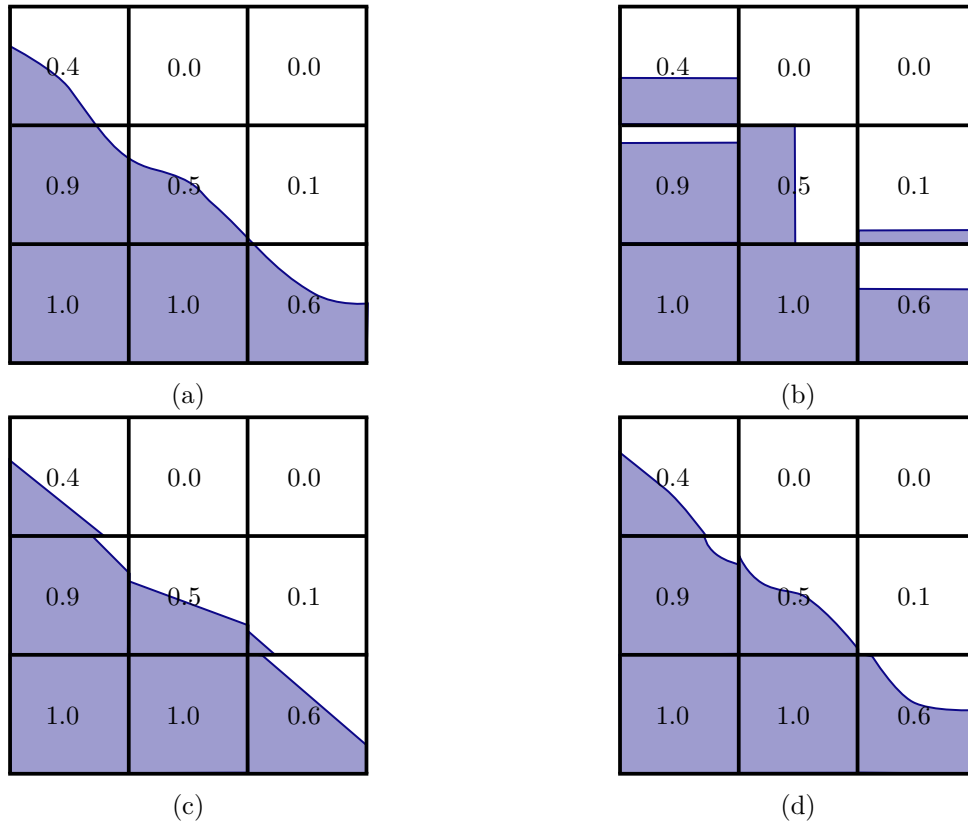


FIGURE 3.4. – Illustration d'une (a) interface réelle, et de la reconstruction de l'interface par les méthodes (b) SLIC, (c) PLIC, (d) PROST

Une fois reconstruite à un instant  $n$ , l'interface est advectée à l'aide du champ vitesse  $u$  ce qui permet d'en déduire la valeur de  $C$  à l'instant  $n + 1$ . La Figure 3.5 donne un exemple de flux de VoF sur la face d'une cellule  $i, j$  qui est donné par :

$$G_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\text{VOL}}{|u_{i+\frac{1}{2},j}| \Delta t \Delta y} \cdot u_{i+\frac{1}{2},j}, \quad (3.39)$$

avec VOL le volume de la cellule advecté en un temps  $\Delta t$  à travers la face  $(i + \frac{1}{2}, j)$  à une vitesse  $u_{i+\frac{1}{2},j}$ . Cette quantité peut être déterminée par des bibliothèques dédiées notamment VoFTools de López et Hernández [2008].

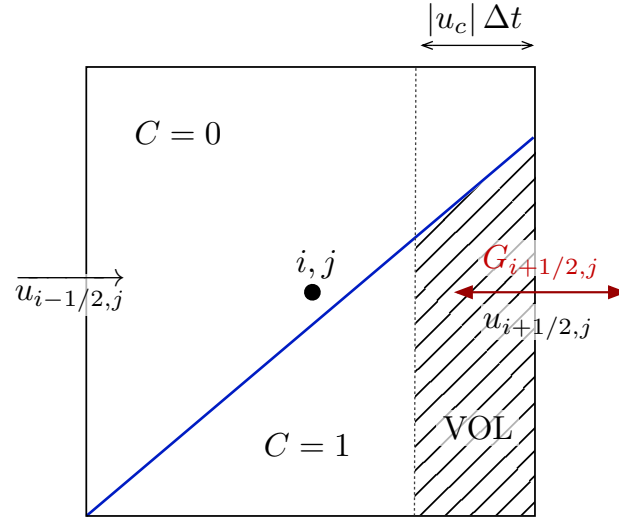


FIGURE 3.5. – Calcul flux de VoF  $G_{i+\frac{1}{2},j}$  sur la face  $i+\frac{1}{2},j$  d'une cellule contenant une interface

### Level Set

La seconde méthode repose aussi sur le transport d'un scalaire  $\Phi$  introduit par Osher et Sethian [1988] correspondant cette fois-ci à une distance signée à l'interface diphasique. Elle est représentée sur la Figure 3.6 et est définie comme :

$$\begin{cases} \Phi > 0 & \text{dans le liquide,} \\ \Phi = 0 & \text{sur l'interface,} \\ \Phi < 0 & \text{dans le gaz.} \end{cases} \quad (3.40)$$

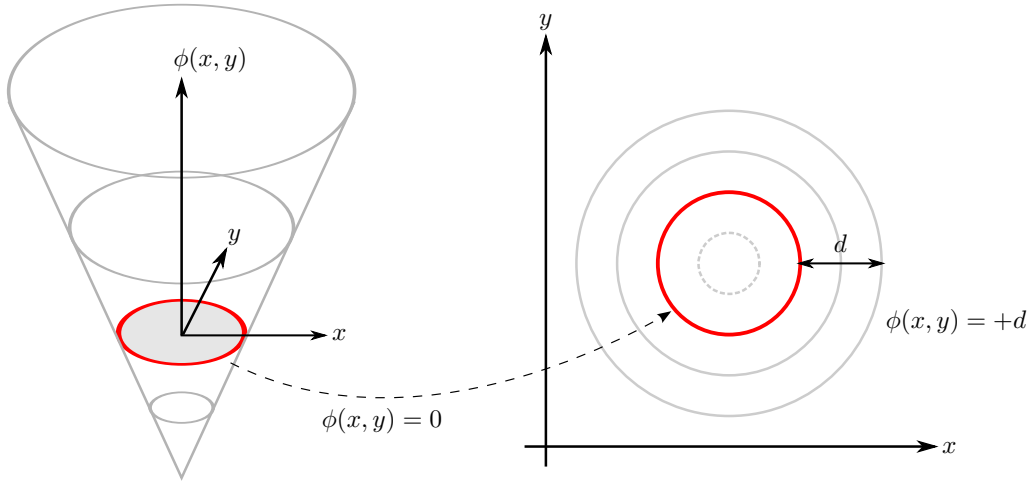


FIGURE 3.6. – Illustration de la fonction Level Set par plusieurs iso-contours, Zuzio [2011]

L'interface entre les deux phases est donc caractérisée par l'iso-surface  $\Phi = 0$  et est convectée à la vitesse de l'écoulement  $u$  et donc dirigée par une loi identique à l'Equation 3.38 :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \nabla \Phi = 0 . \quad (3.41)$$

Cependant, lors du processus de convection par un champ de vitesse cisailant, la fonction Level-Set perd sa propriété de distance à l'interface. Ceci peut être observé par une distance non uniforme entre les lignes d'iso-contours de  $\Phi$ , comme représenté sur la Figure 3.7. Cette perte de



propriété entraîne des erreurs sur le calcul de la courbure importantes qui mènent à une perte de conservativité de la masse. Pour cela Sussman [1994] propose un algorithme de re-distanciation de la fonction Level-Set  $\phi$ , la corrigeant après avoir été convectée. Ce processus passe par la résolution d'une équation aux dérivées partielles sur un temps fictif  $t'$  :

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial t'} &= \text{sgn}(\Phi(x, t)) (1 - \|\Phi\|) , \\ \Phi(x, t' = 0) &= \Phi(x, t) , \end{cases} \quad (3.42)$$

avec  $\text{sgn}$  la fonction indiquant le signe d'une variable  $x$  par :

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 , \\ 0 & \text{si } x = 0 , \\ -1 & \text{si } x < 0 . \end{cases} \quad (3.43)$$

L'Équation 3.42 revient donc à convecter la fonction Level-Set de manière normale à l'interface à partir de son iso-contour  $\Phi = 0$  et converge vers un champ  $\Phi$  correspondant de nouveau à une distance à l'interface.

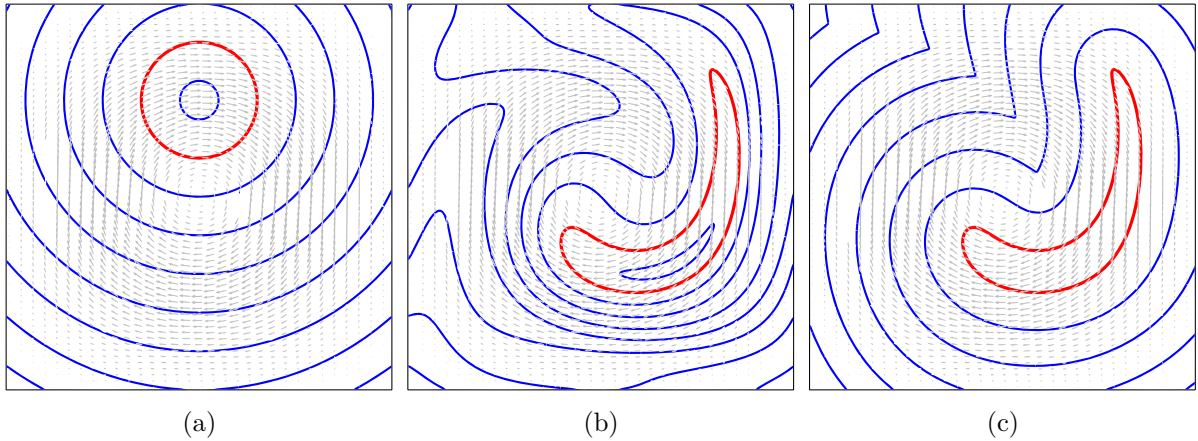


FIGURE 3.7. – Application d'un champ de vitesse rotationnel à la fonction Level-Set : (a) État initial (b) Perte de propriété de distance à l'interface (c) Re-distanciation après advection, Zuzio [2011]

L'intérêt de la Level-Set est la définition directe de la normale à l'interface  $n$  et de sa courbure  $\kappa$  donnée par :

$$n = \frac{\nabla \Phi}{\|\nabla \Phi\|} , \quad (3.44)$$

$$\kappa = \nabla \cdot \frac{\nabla \Phi}{\|\nabla \Phi\|} . \quad (3.45)$$

La résolution pratique de l'équation de Level-Set et de sa redistanciation nécessite des schémas numériques précis en espace et en temps afin de limiter les erreurs d'approximation. Cependant, malgré tous ces efforts, cette méthode engendre des pertes de masse dans les zones de sous résolution de la courbure de l'interface ou peut générer un déplacement de l'iso-contour  $\phi = 0$  lors de la re-distanciation.

### Méthode CLSVOF

La méthode CLSVOF (*Coupled Level Set and Volume Of Fluid*), développée par Sussman et Puckett [2000] propose de combiner les deux méthodes précédemment décrites pour profiter de



leurs avantages, soit la conservativité de la méthode VoF et de la précision du calcul de la normale à l'interface de la méthode Level-Set. L'algorithme est le suivant :

1. Reconstruction de l'interface par une des méthodes citées dans le [Paragraphe 3.2.1.2](#), en utilisant le remplissage de la cellule donné par le champ de VoF et la normale à l'interface donnée par la méthode Level-Set.
2. Transport de la Level-Set et du VoF d'un pas de temps de la simulation.
3. Re-distanciation de la fonction Level-Set.
4. Correction de la Level-Set par le VoF pour vérifier la conservation de la masse.

### 3.2.1.3. Code DyJeAT

Cette section a pour objectif de donner un aperçu du fonctionnement du code DyJeAT (*Dynamics of Jet Atomisation*) développé par Couderc [2007] puis par Zuzio [2011] et Marter [2017]. Il a notamment permis de simuler avec succès l'atomisation de nappes liquides (Zuzio *et al.* [2018], Averseng *et al.* [2019]) et de jets cisailés (Zuzio *et al.* [2020]). Le code prend les hypothèses suivantes :

- Écoulement incompressible
- Fluide newtonien
- Interface infiniment mince
- Pas d'échange de chaleur, donc pas de changement de phase

### Système d'équations

Avec les hypothèses précédentes, les équations de Navier-Stokes deviennent :

$$\nabla u = 0 , \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (u \otimes u) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla \cdot \tau + f , \quad (3.47)$$

avec  $\mu = \mu_l$  et  $\rho = \rho_l$  dans le liquide,  $\mu = \mu_g$  et  $\rho = \rho_g$  dans le gaz. Sur l'interface, les champs de vitesse  $u$  et de pression  $p$  sont discontinus et respectent les conditions de saut :

$$n \cdot [pI - \tau] \cdot n = \sigma \kappa , \quad (3.48)$$

avec  $n$  la normale à l'interface et  $\sigma$  la tension de surface de la phase liquide dans la phase gaz,

$$t \cdot [\tau] \cdot n = 0 , \quad (3.49)$$

et

$$[u] = 0 . \quad (3.50)$$

Ces sauts résultent des effets de tension de surface, de viscosité et d'une condition de non glissement de la vitesse sur l'interface.

La résolution des équations 3.46 et 3.47 est réalisée sur un maillage cartésien structuré et régulier pour faciliter l'implémentation des schémas numériques et atteindre des meilleurs performances sur la parallélisation du calcul. Un maillage de type MAC (*Marker And Cell*) est utilisé, où la pression est calculée au centre des cellules tandis que le vecteur vitesse est estimé à une position décalée d'une demi-maille comme représenté sur la [Figure 3.2.1.3](#). Ceci permet d'exprimer facilement la composante de vitesse en fonction du gradient de pression et inversement.

Les propriétés de l'interface et des deux phases du fluide (viscosité et masse volumique) sont déterminées par la méthode CLSVOF décrite dans le [Paragraphe 3.2.1.2](#) avec une reconstruction

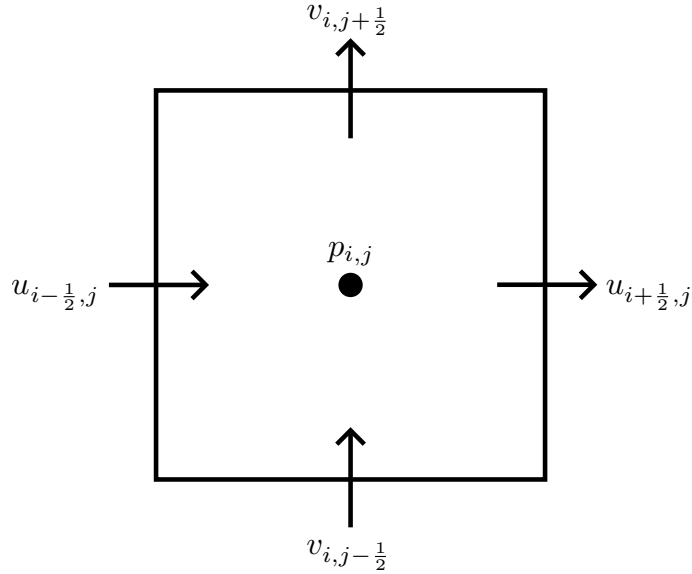


FIGURE 3.8. – Position de calcul des variables pression et vitesse sur un maillage MAC

PLIC. Pour la résolution du système, la méthode de projection développée par J. [1968] est utilisée. Cette méthode propose une solution du principal problème posé par la résolution des équations de Navier-Stokes (non filtrées) qui est le couplage entre la pression et la vitesse. Elle consiste en une résolution successive d'équations découplées suivie par une étape de correction. Le théorème de Helmholtz-Hodge permet de décomposer un champ de vecteur en une partie à divergence nulle (solénoïdal) et une partie irrotationnelle noté  $\nabla\psi$  avec  $\psi$  un potentiel comme :

$$u = u_{\text{sol}} + \nabla\psi . \quad (3.51)$$

Et donc en appliquant l'opérateur de divergence à l'équation précédente, il vient :

$$\nabla \cdot u = \Delta\psi . \quad (3.52)$$

Cette décomposition est à l'origine de l'équation de Poisson en considérant  $p$  comme un potentiel. L'algorithme de Chorin est ensuite appliqué pour faire l'avance en temps :

1. Prédiction : de la vitesse par résolution de l'équation sur la vitesse sans terme de pression :

$$u^* = u^{(n)} + \Delta t^{(n)} \left( -(u^{(n)} \cdot \nabla) u^{(n)} + \frac{\mu}{\rho} \nabla \cdot \tau + f \right) \quad (3.53)$$

2. Calcul de la pression : Résolution de l'équation de Poisson sur la pression à l'instant  $n + 1$  à partir de la vitesse intermédiaire prédite à l'instant  $n$ ,  $u^*$  :

$$\nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho} \nabla p^{(n+1)} \right) = \frac{\nabla \cdot u^*}{\Delta t^{(n)}} \quad (3.54)$$

3. Correction du champ de vitesse intermédiaire  $u^*$  à l'instant  $n + 1$  par la pression à l'instant  $n + 1$  :

$$u^{(n+1)} = u^* - \frac{\Delta t^{(n)}}{\rho} \nabla p^{(n+1)} \quad (3.55)$$

## CMOM

Pour éviter les problèmes de stabilité numérique dans des cas de rapports de densité importants causés par la résolution d'une équation sur la vitesse et non sur la quantité de mouvement, Zuzio

*et al.* [2020] proposent une nouvelle prédiction de vitesse basée sur la conservation du moment. Cette méthode est désignée comme CMOM (*Conservative MOMentum*) et résout une équation de quantité de mouvement et de conservation de masse sur chaque direction  $x_i$  :

$$(\rho_{x_i} u_{x_i})^n = \rho_{x_i}^n u_{x_i}^n, \quad (3.56)$$

$$\rho_{x_i}^* = \rho_{x_i}^n - \Delta t \sum_{\text{faces}} G(\text{face}), \quad (3.57)$$

$$(\rho_{x_i} u)^* = (\rho_{x_i} u_{x_i})^n - \Delta t \sum_{\text{faces}} G(\text{face}) u_{\text{mom}}(\text{face}), \quad (3.58)$$

où la masse volumique dans une cellule est déterminée avec la variable  $C$  du VoF par  $\rho = C\rho_l + (1 - C)\rho_g$ ,  $G$  le flux de VoF donné par l'Equation 3.39 et  $u_{\text{mom}}$  donné par :

$$u_{\text{mom}} = u_{i+\frac{1}{2},j} + \left( \frac{\Delta}{2} - \frac{u_{i+1,j}\Delta t}{2} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial x_i} \right)_{i+\frac{1}{2},j}, \quad (3.59)$$

pour la face  $(i + \frac{1}{2}, j)$  d'une cellule. Chaque cellule est divisée en deux dans chaque direction et la masse volumique est déterminée sur chacune des sous-maillages en utilisant la librairie VoFTools. Enfin, la masse volumique est calculée pour le volume de contrôle centré sur les nœuds de vitesse par une moyenne arithmétique. La Figure 3.9 montre le principe du calcul de  $C$  et  $\rho$  pour deux cellules mixte de vitesse :

$$\rho_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{4} \left( \rho_{i+\frac{1}{4},j+\frac{1}{4}} + \rho_{i+\frac{3}{4},j+\frac{1}{4}} + \rho_{i+\frac{1}{4},j-\frac{1}{4}} + \rho_{i+\frac{3}{4},j-\frac{1}{4}} \right), \quad (3.60)$$

$$\rho_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left( \rho_{i+\frac{1}{4},j+\frac{1}{4}} + \rho_{i+\frac{1}{4},j+\frac{3}{4}} + \rho_{i-\frac{1}{4},j+\frac{1}{4}} + \rho_{i-\frac{1}{4},j+\frac{3}{4}} \right), \quad (3.61)$$

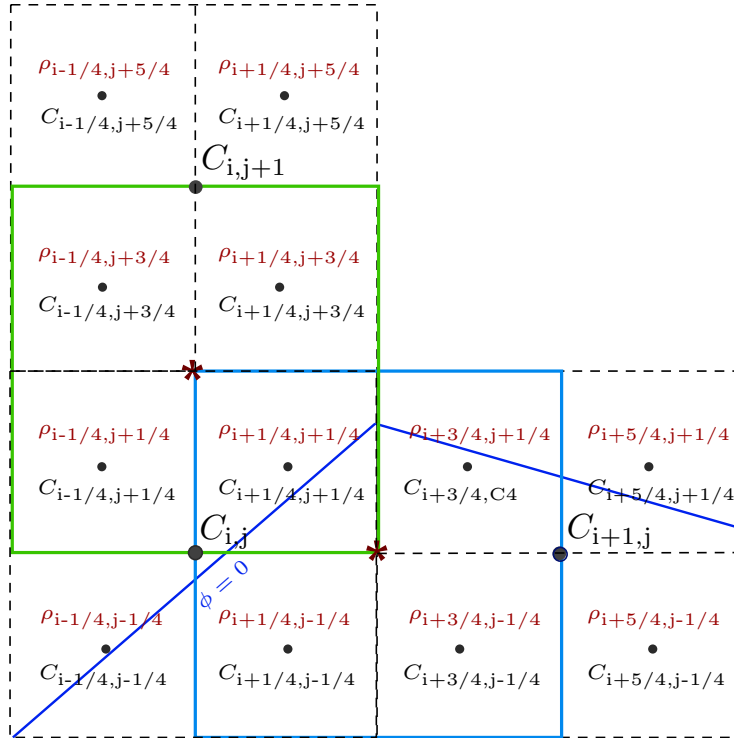


FIGURE 3.9. – Calcul de la masse volumique sur un volume de contrôle de vitesse

et il vient enfin la vitesse intermédiaire  $u_{x_i}^*$  par :

$$u_{x_i}^* = (\rho_{x_i} u_{x_i})^* / \rho_{x_i}^* \quad (3.62)$$

Le CMOM modifie donc la prédiction de la vitesse dans l'algorithme de Chorin. Les étapes suivantes ne sont pas impactées.

### Saut de pression à l'interface

Pour traiter le saut de pression à l'interface, la méthode Ghost-Fluid développée par Fedkiw *et al.* [1999] puis par Gibou *et al.* [2002] est utilisée. La méthode prolonge le domaine de la phase liquide dans le gaz et inversement le domaine du gaz dans le liquide pour pouvoir évaluer la dérivée de la pression de part et d'autre de l'interface diphasique. La Figure 3.10 représente le saut de pression observé par la présence d'une interface entre les cellules  $(i, j)$  et  $(i + 1, j)$ . La méthode Ghost-Fluid donne ainsi les valeurs fantômes de pression de chaque côté de l'interface pour le calcul du gradient :

$$p_i^{(2)} = p_i^G = p_i^{(1)} + [p] , \quad (3.63)$$

$$p_{i+1}^{(1)} = p_{i+1}^G = p_{i+1}^{(2)} - [p] , \quad (3.64)$$

avec  $[p]$  le saut de pression sur l'interface. Le même principe est appliqué pour le saut de viscosité sur l'interface.

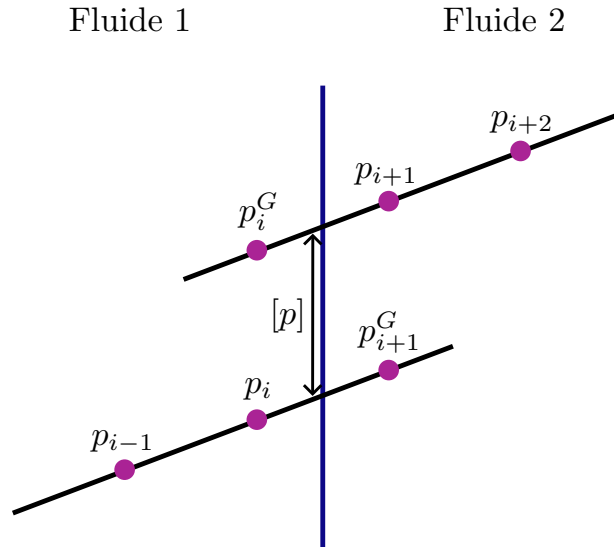


FIGURE 3.10. – Principe méthode Ghost-Fluid sur la pression pour une interface située entre les cellules  $(i, j)$  et  $(i + 1, j)$

### Schémas numériques

- La discrétisation spatiale des équations d'advection de la Level-Set sont réalisées avec un schéma WENO d'ordre 5 (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) de Jiang et Shu [1996], très robuste et adapté aux équations 3.38 et 3.41.
- Une méthode de gradient-conjugué pré-conditionné par une méthode multi-grille est utilisée pour la discrétisation spatiale de l'équation de pression (Couderc [2007])
- Les termes visqueux sont discrétisés par un schéma centré d'ordre 2

- Comme pour la Level-Set et le VoF, les termes convectifs sont discrétisés par un schéma WENO 5 sur un maillage MAC (et donc nécessite les interpolations explicitées pour la densité dans cette section)
- L'intégration temporelle de la Level-Set, du VoF et de la prédiction de la vitesse se fait par une méthode de Runge-Kutta explicite d'ordre 2. L'intégration est pilotée par un nombre de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) comme condition de convergence de la résolution du système. La condition est exprimée par Kang *et al.* [2000] en combinant les effets convectifs, visqueux, gravitationnel et capillaire. En 2D les termes s'expriment :

$$\begin{aligned}
 c_{\text{conv}} &= \max\left(\frac{\|u_x\|_\infty}{\Delta x}, \frac{\|u_y\|_\infty}{\Delta y}\right), \\
 c_{\text{visc}} &= \max\left(\frac{\mu_l}{\rho_l}, \frac{\mu_g}{\rho_g}\right) \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2}\right), \\
 c_{\text{grav}} &= \sqrt{\max\left(\text{abs}\left(\frac{g_x}{\Delta x}\right), \text{abs}\left(\frac{g_y}{\Delta y}\right)\right)}, \\
 c_{\text{capil}} &= \frac{\sigma\|\kappa\|_\infty}{\min(\rho_g, \rho_l)\min(\Delta x, \Delta y)^2},
 \end{aligned} \tag{3.65}$$

et donne la condition globale sur le CFL :

$$\Delta t^n \left( c_{\text{conv}} + c_{\text{visc}} + \sqrt{(c_{\text{conv}} + c_{\text{visc}})^2 + 4(c_{\text{grav}} + c_{\text{capil}})} \right) \leq 2\text{CFL}, \tag{3.66}$$

où on prend généralement  $\text{CFL} = 0.5$  pour garantir la stabilité.

## Autres méthodes

Il existe d'autres méthodes qui ne seront pas détaillées dans ce manuscrit car elles produisent des résultats moins précis que les approches précédemment citées et sont donc en conséquence peu répandues dans la littérature. On peut noter notamment le VoF algébrique (Marić *et al.* [2020]) où on laisse diffuser l'interface ou encore l'équation de Cahn-Hilliard (Khanwale *et al.* [2022]) décrivant la séparation spontanée des phases.

### 3.2.2. Méthodes multi-fluides à interface diffuse

Une autre manière de simuler un écoulement diphasique est de supposer que chaque fluide soit présent à tout moment dans tout l'espace, en concentration, ou fraction volumique, variable : les équations des deux phases sont multipliées par une fonction indicatrice de phase, et l'écoulement dans chaque phase est décrit par homogénéisation des équations. Cette opération génère des termes d'interaction entre les phases qui doivent être modélisés. L'interface diphasique n'est alors plus représentée par une discontinuité infiniment mince comme elle est supposée l'être. Cette différence de paradigme entre une interface diffuse et reconstruite est illustrée sur la Figure 3.11.

Cette section présente cette approche et en particulier celle utilisée dans le code multiphysique CEDRE (Calcul d'Écoulements Diphasiques Réactifs pour l'Énergie). Pour avoir une description exhaustive de ces approches le lecteur peut se rattacher aux thèses de Le Touze [2015] ou encore de Labois [2008].

#### 3.2.2.1. Modèle général

Le processus d'homogénéisation des équations consiste à étendre les équations monophasiques 3.4 aux deux phases  $\Omega_k$  ainsi qu'à l'interface. Pour cela, on définit la fonction indicatrice de phase comme la fraction volumique de la phase  $k$  par :

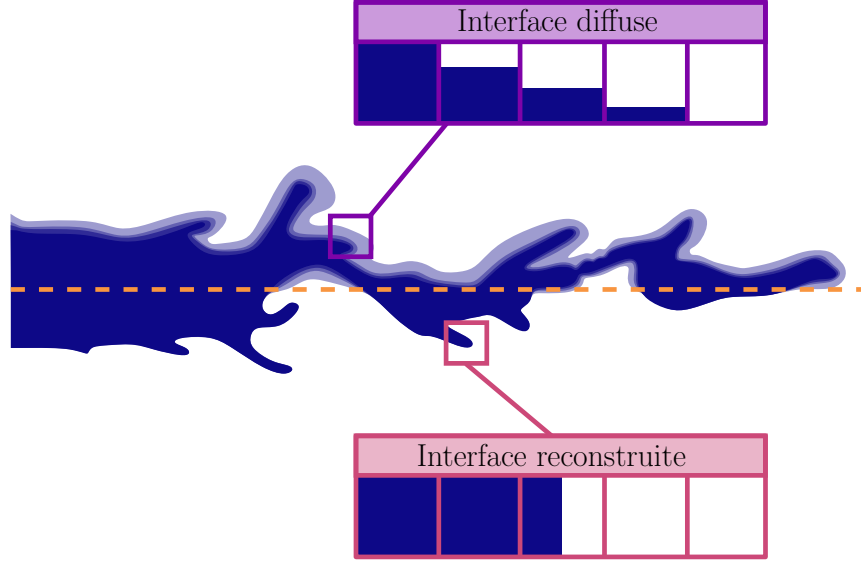


FIGURE 3.11. – Représentation d'un jet coaxial dont l'interface est modélisée par une interface diffuse ou reconstruite

$$\alpha_k(x, t) = \frac{V_k}{\sum_i V_i}, \quad (3.67)$$

avec  $V_k$  le rapport entre le volume de la phase  $k$  sur le volume total des phases. On aboutit ainsi à un système de 6 équations, avec une équation de conservation de masse, une équation de conservation de quantité de mouvement et une équation d'énergie par phase. Cependant, ce système est non hyperbolique et est donc mal posé au sens d'Hadamard, ce qui entraîne des difficultés numériques pour le résoudre. Baer et Nunziato [1986] proposent d'ajouter une équation supplémentaire de transport de la fraction volumique d'une des phases rendant le système inconditionnellement hyperbolique et amenant le nombre d'équations à 7. La notion de dérivée au sens des distributions permet d'introduire la fonction caractéristique à l'intérieur des opérateurs différentiels. Les équations du modèle de Baer-Nunziato ou modèle à 7 équations est finalement donné par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k) &= -\rho_k (u_k - u_I) \cdot n_k \delta_{ik}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k \otimes u_k) &= \nabla [\alpha_k (\tau_k - p_k I)] + \alpha_k \rho_k f_k \\ &\quad - [\rho_k u_k \otimes (u_k - u_I) - (\tau_k - p_k I)] \cdot n_k \delta_{ik}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k e_{\text{tot},k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k e_{\text{tot},k}) &= \nabla \left[ \alpha_k \left( (\tau_k - p_k I) u_k - J_{e_t,k} \right) \right] + \alpha_k \rho_k f_k \cdot u_k \\ &\quad - \left[ \rho_k e_{\text{tot},k} (u_k - u_I) - (\tau_k - p_k I) \cdot u_k + J_{e_t,k} \right] \cdot n_k \delta_{ik}, \\ \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + u_{\text{interf}} \cdot \nabla \alpha_k &= \alpha_{k,\text{interf}} \quad \text{où } k \in \{1, 2\}, \end{aligned} \quad (3.68)$$

avec  $u_I$  la vitesse de l'interface,  $\alpha_{k,\text{interf}}$  un terme de production/destruction et en rouge tous les termes d'échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases.

### 3.2.2.2. Relaxation du modèle de Baer-Nunziato

La résolution pratique du système d'équations de Baer-Nunziato est néanmoins complexe de part le nombre de termes à modéliser et entraîne des coûts de calcul importants car nécessite

de résoudre 7 équations dans chaque cellule. Le modèle général peut cependant être relaxé vers des modèles plus simples en prenant des hypothèses sur les temps caractéristiques de tous les phénomènes physiques mis en jeu. Labois [2008] a mis en évidence la hiérarchie suivante :

$$\mathcal{T}_p \ll \mathcal{T}_u \ll \mathcal{T}_T \ll \mathcal{T}_g, \quad (3.69)$$

avec  $\mathcal{T}_p$ ,  $\mathcal{T}_u$ ,  $\mathcal{T}_T$ ,  $\mathcal{T}_g$  les temps de relaxation respectivement relatifs à la pression, à la vitesse, à la température, et au potentiel chimique. Cette ensemble d'inégalités met en évidence que les pressions entre les phases tendent vers une valeur d'équilibre plus rapidement que les vitesses, qui se relaxent plus rapidement que les températures. Les potentiels chimiques quant à eux sont les grandeurs qui se relaxent le plus lentement. À partir de ces observations, et en fonction des applications visées, on peut faire des hypothèses sur une relaxation infiniment rapide de certaines variables pour réduire le nombre d'équations. Les modèles relaxés du modèle de Baer-Nunziato sont résumés dans le [Tableau 3.3](#).

Nom du modèle	Variable relaxée	Equations résolues	Hyperbolicité
7 équations	-	2× masse	Oui
		2× QDM	
		2× énergie	
		1× frac. vol	
6 équations	Pression	2× masse	Non
		2× QDM	
		2× énergie	
5 équations	$p +$ Vitesse	2× masse	Oui
		1× QDM	
		2× énergie	
4 équations	$p, u +$ Température	2× masse	Oui
		1× QDM	
		1× énergie	
3 équations	$p, u, T +$ Potentiel chimique	1× masse	Oui
		1× QDM	
		1× énergie	

TABLE 3.3. – Hiérarchie de modèles diphasiques obtenus par relaxation du modèle général, Le Touze [2015]

### 3.2.2.3. Solveur CHARME de CEDRE

Dans cette thèse on s'intéresse en particulier au modèle à 4 équations considérant un équilibre infiniment rapide pour la pression, la vitesse et la température entre les phases. En effet, c'est ce modèle qui a été implémenté dans CEDRE, et nommé CHARME, pour simuler des écoulements diphasiques réactifs. Le système d'équations 3.68 de Baer-Nunziato est donc réduit à 4 équations dans le cas d'une espèce par phase. Pour réaliser des simulations avec des réactions chimiques, il est nécessaire d'avoir au moins 3 espèces dans la phase gazeuse et une espèce dans la phase liquide. En reprenant les notations choisies par Le Touze [2015], cette section décrit le système d'équations qui est résolu.

Ainsi, on considère un fluide composé de  $N_{\text{tot}}$  espèces avec 1 espèce liquide évaporante (comburant) et  $N_g$  espèces gazeuses (carburant et produits de combustion). On note  $i$  l'indice d'une

espèce chimique, alors les espèces chimiques sont ordonnées par :

$$\begin{cases} i = N_{\text{tot}} & \text{espèce liquide ,} \\ i = N_g & \text{espèce gazeuse évaporée de la phase liquide ,} \\ 1 \leq i \leq N_g - 1 & \text{autres espèces gazeuse .} \end{cases} \quad (3.70)$$

Le vecteur  $Q$  des quantités conservées s'exprime :

$$U = (\rho Y_1 \quad \dots \quad \rho Y_{N_g} \quad \rho Y_{N_{\text{tot}}} \quad \rho u \quad \rho e_{\text{tot}})^t, \quad (3.71)$$

avec  $Y$  la fraction massique de chacune des espèces. Le vecteur  $U$  de l'ensemble des variables naturelles du système peut ensuite être défini :

$$Q = (p \quad T \quad u \quad Y_1 \quad \dots \quad Y_{N_g} \quad Y_{N_{\text{tot}}})^t, \quad (3.72)$$

avec  $T$  la température du fluide.

### Équations de Navier-Stokes

On peut réécrire l'équation de conservation de la masse par espèce comme dépendante de la fraction massique  $Y_i$  de l'espèce  $i$  par :

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i u) = -\nabla \cdot J_i + \dot{\omega}_i, \quad (3.73)$$

avec  $J_i$  son flux de diffusion modélisé par une loi de Fick sur la fraction massique des espèces d'une même phase :

$$J_i = -\rho D_i \nabla Y_i, \quad (3.74)$$

avec  $D_i$  le coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce  $i$ .  $\dot{\omega}_i$  est le terme source de production d'espèces par réaction chimique réalisée uniquement dans le gaz, et est donc nul dans la phase liquide pour  $i = N_{\text{tot}}$ . La thèse ne traitant pas d'écoulements réactifs, on ne détaillera pas toutes les manières de modéliser ce terme fortement non linéaire, mais le lecteur pourra se référer à de très nombreux ouvrages traitant de ce sujet dans la littérature, [Poinsot et Veynante \[2012\]](#) ou encore [Le Touze \[2015\]](#) pour un aperçu des modèles disponibles dans CEDRE. En sommant les équations de conservation des espèces on doit retrouver la conservation de masse totale du système et il vient que le somme des flux de diffusion moléculaire des espèces doit être nulle :

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}} J_i = 0, \quad (3.75)$$

et que la somme des termes sources chimiques doit aussi être nulle :

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}} \dot{\omega}_i = 0. \quad (3.76)$$

L'unique équation de quantité de mouvement pour les deux phases s'écrit de manière classique :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = \nabla \cdot [\tau - (\tau_{\text{capil}} + pI)] + \rho f, \quad (3.77)$$

avec  $\tau_{\text{capil}}$  le tenseur des contraintes capillaires. Ce terme vient prendre en compte les effets de l'interface sur la quantité de mouvement qui ne peuvent plus être représentés par une relation de saut comme cela est fait pour une approche mono-fluide (équations 3.48, 3.49 et 3.50). L'expression du tenseur capillaire provient de la force  $f_{\text{capil}}$  qui lui est associée. De manière générale, cette force s'exprime :



$$f_{\text{capil}} = \sigma \kappa \delta_{\text{interf}} n = -\nabla \tau_{\text{capil}} , \quad (3.78)$$

avec  $n$  la normale à l'interface et  $\delta_{\text{interf}}$  la fonction de Dirac, non nulle sur l'interface. En interface reconstruite la normale est calculée par l'Equation 3.44 et la courbure par l'Equation 3.45 à partir de la Level-Set. Sans reconstruction d'interface, ces deux grandeurs ne sont donc a priori pas connues et doivent être modélisées. Pour cela on utilise la fraction volumique de liquide définie par :

$$\alpha_l = \frac{\rho Y_{N_{\text{tot}}}}{\rho_l} , \quad (3.79)$$

avec  $\rho$ , la masse volumique du mélange (définie dans le Paragraphe 3.2.2.3) et  $\rho_l$  la masse volumique de l'espèce liquide, ce qui donne une estimation de la normale à l'interface :

$$\delta_{\text{interf}} n \approx \|\nabla \alpha_l\| , \quad (3.80)$$

et de sa courbure :

$$\kappa \approx \nabla \cdot \left( \frac{\nabla \alpha_l}{\|\nabla \alpha_l\|} \right) . \quad (3.81)$$

À partir de ces formulations, le tenseur des contraintes capillaires s'exprime dans sa formulation conservative CSS (*Continuum Surface Stress*) :

$$\tau_{\text{capil}} = \sigma \|\nabla \alpha_l\| \left( I - \frac{\nabla \alpha_l}{\|\nabla \alpha_l\|} \otimes \frac{\nabla \alpha_l}{\|\nabla \alpha_l\|} \right) . \quad (3.82)$$

Enfin, l'unique équation d'énergie pour les deux phases s'exprime aussi en fonction du tenseur des contraintes capillaires :

$$\frac{\partial e_{\text{tot}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_{\text{tot}} u) = \nabla \cdot [(\tau - (\tau_{\text{capil}} + pI)) \cdot u] - \nabla \cdot J_{e_{\text{tot}}} + \rho f \cdot u , \quad (3.83)$$

avec  $J_{e_{\text{tot}}}$  le flux d'énergie totale modélisé comme une somme de flux exprimés par rapport au gradient de fraction massique  $J_i$  :

$$J_{e_{\text{tot}}} = q + \sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}} h_i J_i , \quad (3.84)$$

où  $h_i$  est l'enthalpie de l'espèce  $i$  et  $q$  le flux de diffusion de chaleur par conduction, que l'on exprime par la loi de Fourier :

$$q = -\lambda \nabla T , \quad (3.85)$$

avec  $\lambda$  la conductivité du fluide qui caractérise sa capacité à transmettre de l'énergie thermique de proche en proche.

### Fermetures thermodynamiques

Pour la résolution du système des équations de conservation du fluide, les fermetures thermodynamiques sont des relations permettant de faire le changement de variables  $Q(U) \leftrightarrow U(Q)$ . Un schéma d'avance en temps permet d'obtenir les quantités conservées  $Q^{(n+1)}$  à partir de celles de l'état  $Q^{(n)}$ . On obtient ensuite les variables naturelles à l'état  $n+1$  par le changement de variable :

$$\begin{aligned}\rho^{(n+1)} &= \sum_i (\rho Y_i)^{(n+1)}, \quad Y_i = \frac{(\rho Y_i)^{(n+1)}}{\rho^{(n+1)}}, \quad u^{(n+1)} = \frac{(\rho u)^{(n+1)}}{\rho^{(n+1)}}, \\ e_{\text{tot}}^{(n+1)} &= \frac{(\rho e_{\text{tot}})^{(n+1)}}{\rho^{(n+1)}}, \quad e^{(n+1)} = e_{\text{tot}}^{(n+1)} - \frac{1}{2} u^{(n+1)} \cdot u^{(n+1)}.\end{aligned}\quad (3.86)$$

Pour avoir toutes les composantes du vecteur  $U^{(n+1)}$ , il reste à déterminer les variables  $p^{(n+1)}$  et  $T^{(n+1)}$ . Pour cela un algorithme de Newton est utilisé, qui s'exprime avec  $i$  l'indice de l'itération du processus :

$$\begin{aligned}p^{(i+1)} &\approx p^{(i)} + \overline{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)}_e (\rho^{(n+1)} - \bar{\rho}) + \overline{\left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)}_\rho (e^{(n+1)} - \bar{e}), \\ T^{(i+1)} &\approx T^{(i)} + \overline{\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)}_e (\rho^{(n+1)} - \bar{\rho}) + \overline{\left(\frac{\partial T}{\partial e}\right)}_\rho (e^{(n+1)} - \bar{e}),\end{aligned}\quad (3.87)$$

où  $\bar{\bullet}$  correspond aux grandeurs moyennes dans le fluide calculées à partir de  $p^i$ ,  $T^i$  et  $Y_j^{n+1}$ , détaillé dans le [Paragraphe 3.2.2.3](#) (Loi de mélange). De plus, en cherchant à résoudre les équations de Navier-Stokes compressibles, la vitesse du son  $c$  est un paramètre clé pour la propagation des ondes acoustiques dans le fluide ainsi que pour la stabilité numérique du système et est définie par :

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s = \frac{1}{\rho \beta_s}, \quad (3.88)$$

avec  $s$  l'entropie du système et  $\beta_s$  le coefficient de compressibilité isentropique. Les équations d'état permettent de décrire le comportement d'une phase dans des conditions thermodynamiques  $p$ ,  $T$ .

### Loi des gaz parfaits

L'équation d'état la plus connue est celle des gaz parfaits établie par Clapeyron en 1834. En négligeant les interactions entre les molécules hormis les collisions et pour une pression et température modérée, la loi des gaz parfaits donne une relation entre la pression  $p$ , la température  $T$  et la densité  $\rho$  du milieu gazeux :

$$\rho(p, T) = \frac{p}{rT}, \quad (3.89)$$

où  $r$  est la constante spécifique d'un gaz :

$$r = \frac{R}{M}, \quad (3.90)$$

de masse molaire  $M$ , pris comme une moyenne des masses molaires des espèces le composant et  $R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$  la constante des gaz parfaits. Les conditions d'utilisation du modèle peuvent être étendues aux températures faibles ou aux pressions élevées par ajout d'un facteur correctif qui peut prendre diverses formes (Clausius, Dieterici, Van der Waals) et est nommé gaz réel. Les relations de Laplace donnent une loi d'évolution pour un gaz subissant une transformation adiabatique et réversible qui vérifie :

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \text{cste}, \quad (3.91)$$

avec  $\gamma = C_p/C_V$  l'indice adiabatique donné par le rapport entre la capacité thermique isobare

sur la capacité thermique isochore du gaz. Avec l'Equation 3.88, il vient l'expression de la vitesse du son dans un gaz parfait :

$$c = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s} = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}} = \sqrt{\gamma r T} \quad (3.92)$$

### Loi liquide compressible

Pour la phase liquide on donne une loi d'état dépendante de la pression  $p$ , de la température  $T$ , autour d'un état de référence  $\rho_0$ .  $\alpha_0$  est le coefficient thermoélastique de dilatation isobare et  $\beta_0$  est le coefficient thermoélastique de dilatation isotherme à l'état de référence :

$$\rho(p, T) = \rho_0 \frac{1 + \alpha_0(T - T_0)}{1 + \beta_0(p - p_0)} . \quad (3.93)$$

Cette loi donne une estimation de  $\rho$  pour des variations proches de l'état de référence, donc valable pour les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \alpha_0 |T - T_0| \ll 1 \\ \beta_0 |p - p_0| \ll 1 \end{cases} \quad (3.94)$$

Le calcul de la vitesse du son avec la loi d'état liquide compressible utilise la relation de Mayer :

$$c_p - c_v = \frac{\alpha_0^2}{\beta_0 \rho_0} \frac{T}{1 + \alpha_0(T - T_0)} . \quad (3.95)$$

En exprimant les dérivées partielles de la pression par rapport aux variables thermodynamiques du système la vitesse du son s'exprime enfin par :

$$c = \frac{1 + \alpha_0(T - T_0)}{\sqrt{\beta_0 \rho_0 [1 + \alpha_0(T - T_0)] - \alpha_0^2 T / c_p}} . \quad (3.96)$$

La vitesse du son est naturellement plus élevée dans la phase liquide que dans la phase gazeuse, et est donc le facteur limitant pour des conditions de stabilité numérique de type CFL.

### Loi de mélange

En présence d'une interface diffuse, il faut déterminer comment évaluer les grandeurs moyennes du mélange artificiel entre les deux phases. Ces grandeurs permettent de fermer la procédure itérative décrite par les équations 3.87. La valeur moyenne  $\bar{\phi}$  d'une grandeur massique  $\phi$  est pondérée par la fraction massique  $Y_i$  des espèces de la phase :

$$\bar{\phi}(p, T) = \sum_i Y_i \phi_i(p, T) , \quad \phi = \left\{ c_p, c_v, \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_p, \left(\frac{\partial e}{\partial p}\right)_T, \dots \right\} . \quad (3.97)$$

Cependant certaines quantités comme les dérivées partielles de masses volumiques ou la vitesse du son ne peuvent pas s'exprimer de cette manière. Pour cela, Le Touze [2015] introduit un paramètre  $R_{\text{mel}}$  défini indépendamment des lois d'état :

$$R_{\text{mel}} = \frac{p}{\rho T} . \quad (3.98)$$

Ce paramètre est une grandeur massique donnée en  $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  et dont on peut donc expliciter sa valeur moyenne pour un mélange donné avec l'Equation 3.97. Ainsi, on peut exprimer les grandeurs moyennes non massiques en fonction de  $R_{\text{mel}}$  et de ses dérivées. Par exemple pour la masse volumique :

$$\bar{\rho} = \frac{p}{R_{\text{mel}}T}, \quad (3.99)$$

et pour ses dérivées :

$$\begin{aligned} \overline{\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T} &= \bar{\rho} \bar{\beta}_T = \frac{\bar{\rho}}{p} \left[ 1 - \frac{p}{R_{\text{mel}}} \overline{\left(\frac{\partial R_{\text{mel}}}{\partial p}\right)_T} \right], \\ \overline{\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p} &= \bar{\rho} \bar{\alpha} = \frac{\bar{\rho}}{T} \left[ 1 + \frac{T}{R_{\text{mel}}} \overline{\left(\frac{\partial R_{\text{mel}}}{\partial T}\right)_p} \right], \end{aligned} \quad (3.100)$$

faisant apparaître les moyennes des coefficients thermoélastiques du fluide. Enfin, la vitesse du son s'exprime :

$$\bar{c}^2 = \overline{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s} = \frac{1}{\bar{\rho}} \bar{\beta}_s = \frac{\bar{\gamma}}{\bar{\rho}} \bar{\beta}_T, \quad (3.101)$$

où  $\bar{\gamma}$  l'indice adiabatique moyen du mélange est donné par :

$$\bar{\gamma} = \left( 1 - \frac{T \bar{\alpha}^2}{\bar{\rho} \bar{c}_p \bar{\beta}_T} \right)^{-1}. \quad (3.102)$$

Même si cela n'apparaît pas de manière évidente, au vu de sa formulation complexe, la vitesse du son du mélange peut être inférieure aux vitesses du son dans les phases pures. Ce résultat à été observé expérimentalement par Wallis [1969] sur des écoulements de bulles dans une phase liquide ou de gouttes dans une phase gazeuse.

### Compression de l'interface

La discrétisation spatiale du système donné dans le [Section 3.2.2.3](#) est réalisée par un schéma MUSCL (*Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws*) multi-pente pour maillage non structuré introduit par Le Touze *et al.* [2015] et décrit en détail par Le Touze [2015]. Afin de limiter une diffusion excessive de l'interface causée par l'utilisation d'une discrétisation spatiale d'ordre 2, un limiteur compressif de l'interface basé sur les travaux de Blanchard [2015] a été mis en place. Son fonctionnement dans le solveur CHARME a été explicité par Le Touze et Rutard [2022] et a permis de montrer une grande efficacité sur des cas de ballottements de réservoir et d'interaction entre une goutte et un choc. Le lecteur peut trouver un aperçu de l'ensemble des méthodologies disponible dans la littérature dans la revue annuelle de Saurel et Pantano [2018].

### 3.2.3. Phase dispersée cinétique

Dans un contexte industriel, le spray généré est constitué d'une grande variété de gouttes, dont les plus petites pouvant avoir une taille de plusieurs ordres de grandeurs inférieure aux dimensions géométriques caractéristiques de la configuration ([Section 2.3.2](#)). La simulation par méthode à phases séparées d'un tel écoulement implique donc des maillages très fins, indépendamment de l'approche utilisée pour traiter la turbulence (RANS, LES ou DNS). Une autre approche pour simuler le spray d'une configuration atomisante, très largement répandue dans la littérature (par exemple Treleaven *et al.* [2022]), est de modéliser l'intégralité des échelles du spray par des gouttes sans simuler le cœur liquide et donc l'atomisation.

Les approches à phase dispersée considèrent l'ensemble des gouttes comme un système de particules interagissant entre elles ainsi qu'avec la phase gazeuse, par analogie à la description statistique d'un système thermodynamique hors équilibre développé par Boltzmann en 1872 régissant la dynamique de molécules. Basé sur cette analogie, l'équation cinétique de Williams-Boltzmann (Williams [1958]) décrit l'évolution macroscopique d'un spray évoluant dans une phase gazeuse. L'ensemble des variables pour décrire le "brouillard" de gouttes sont : le temps  $t$ , la position  $x$ ,

la vitesse  $u$ , la taille  $s$  (diamètre, surface ou volume) et la température  $T$ . La dynamique du brouillard est ensuite décrite par une fonction de probabilité  $f$  (dépendante des variables précédemment citées ( $t, x, u, s, T$ )) du nombre de gouttes par unité de volume ou NDF (*Number Density Function*) qui suit la loi :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_x \cdot (uf) + \nabla_u \cdot (Ff) + \frac{\partial}{\partial s}(Kf) + \frac{\partial}{\partial T}(Rf) = \Gamma + Q, \quad (3.103)$$

avec :

- $\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_x \cdot (uf)$  le terme de transport de la goutte.
- $F$  les forces extérieures appliquées aux gouttes. Ces forces peuvent être celles de gravité ou d'interaction avec la phase gazeuse.
- $K$  le terme lié au changement de taille de la goutte (évaporation, condensation).
- $R$  caractérisant les variations de température de la goutte par échange de chaleur avec la phase porteuse.
- $\Gamma(f)$  modélisant la fragmentation des gouttes.
- $Q(f)$ , le terme d'interactions, modélisant la coalescence et la collision des particules.

Pour simplifier la résolution du système une hypothèse courante est de considérer des gouttes sphériques et ponctuelles. Le domaine de validité de cette hypothèse dépend du nombre de Knudsen :

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}, \quad (3.104)$$

avec  $\lambda$  le libre parcours moyen des gouttes (distance statistique de collision entre de 2 gouttes) et  $L$  une dimension caractéristique. Les équations de Navier-Stokes utilisent une hypothèse de milieu continu  $\text{Kn} \ll 1$  et on prend généralement une hypothèse inverse,  $\text{Kn} \gg 1$  pour la résolution de l'équation de Williams-Boltzmann. Ainsi, le terme de collisions est considéré comme nul et on parle de phase dispersée pour mettre en évidence cette hypothèse. De manière générale  $F$ ,  $K$  et  $R$  dépendent de toutes les variables du système ce qui rend la résolution de l'Equation 3.103 très complexe. Les différentes méthodes pour résoudre l'équation cinétique sont explicitées dans la suite de cette section.

### 3.2.3.1. Méthode full spray

La méthode full spray consiste à résoudre l'équation cinétique de Williams-Boltzmann sans hypothèse sur la dépendance de la fonction  $f$  sur les variables du système  $t, x, u, s$  et  $T$ . L'espace des phases contient donc :

- 1 dimension temporelle,
- 3 dimensions de l'espace physique,
- 3 dimensions de l'espace des vitesses,
- 1 dimension de l'espace des tailles,
- 1 dimension de l'espace des températures.

Il en résulte un espace des phases à 9 dimensions qui contraint la méthode à des applications académiques (O'Rourke [1981]) à cause de son coût très élevé.

### 3.2.3.2. Méthodes lagrangiennes

L'approche mixte lagrangienne (Section 3.2) consiste à suivre des particules ponctuelles  $p$  représentatives des gouttes évoluant dans une phase porteuse le long de leur trajectoire dans le domaine de calcul. Dans un premier temps, on peut affecter une particule numérique à chaque goutte physique, c'est l'approche DPS (pour *Discrete Particle Simulation*). Cependant, le nombre

de gouttes nécessitant d'être simulé peut être très élevé, ce qui engendre des coûts de calculs importants pour une application industrielle. Afin de diminuer les coûts de calcul, en pratique on simule l'évolution de particules numériques regroupant un ensemble de gouttes ayant les mêmes propriétés physiques (taille, température, vitesse, position). On prend ainsi  $f$  sous la forme d'une somme de diracs correspondant à des particules numériques :

$$f(t, x, u, s, T) = \sum_{\mathbf{p}} \omega^{(\mathbf{p})} \delta(x - x^{(\mathbf{p})}) \delta(u - u^{(\mathbf{p})}) \delta(s - s^{(\mathbf{p})}) \delta(T - T^{(\mathbf{p})}) , \quad (3.105)$$

avec  $\omega_{\mathbf{p}}$  le poids numérique de la particule  $\mathbf{p}$ , qui caractérise le nombre de gouttes représenté par une particule numérique. En appliquant l'Equation 3.105 dans l'Equation 3.103, on aboutit aux équations suivantes :

$$\frac{dx^{(\mathbf{p})}}{dt} = u^{(\mathbf{p})} , \quad (3.106)$$

$$\frac{dm^{(\mathbf{p})} u^{(\mathbf{p})}}{dt} = F^{(\mathbf{p})} , \quad (3.107)$$

$$\frac{ds^{(\mathbf{p})}}{dt} = \dot{s}_v , \quad (3.108)$$

$$\frac{dm^{(\mathbf{p})} h^{(\mathbf{p})}}{dt} = \Phi_c^{(\mathbf{p})} , \quad (3.109)$$

avec  $F^{(\mathbf{p})}$  l'ensemble des forces extérieures s'exerçant sur la particule. En général, dans un référentiel fixe, on considère que la force de traînée de la phase porteuse est la principale action sur les gouttes :  $F^{(\mathbf{p})} = F_{\text{drag}}^{(\mathbf{p})}$ .  $\dot{s}_v$  est le terme source de la variation de taille (ici écrit pour la surface) de la particule liée à son évaporation, et  $\Phi_c$  le flux de chaleur issu de la phase porteuse. La formulation des termes sources est commune à l'approche eulérienne et est donc donnée dans la Section 3.2.3.4.

### Termes source de la phase porteuse

Les échanges de masse, quantité de mouvement et énergie de la phase porteuse (gazeuse) vers la modélisation lagrangienne du spray ont été explicitées. En retour les gouttes exercent sur la phase porteuse une action opposée qui se matérialise par un terme source  $S$  dans les équations de conservation de masse, quantité de mouvement et d'énergie (par exemple dans le système monophasique 3.4). Le terme d'échange de masse s'écrit :

$$S_M^g = \sum_{\mathbf{p}} \dot{m}_v^{(\mathbf{p})} \delta(x - x^{(\mathbf{p})}) , \quad (3.110)$$

puis le terme de quantité de mouvement :

$$S_U = \sum_{\mathbf{p}} \left( \dot{m}_v^{(\mathbf{p})} u^{(\mathbf{p})} - F^{(\mathbf{p})} \right) \delta(x - x^{(\mathbf{p})}) , \quad (3.111)$$

et enfin le terme d'énergie :

$$S_E = \sum_{\mathbf{p}} \left( \dot{m}_v^{(\mathbf{p})} h^{(\mathbf{p})} - F^{(\mathbf{p})} u^{(\mathbf{p})} - \Phi_g^{(\mathbf{p})} \right) \delta(x - x^{(\mathbf{p})}) , \quad (3.112)$$

avec  $\Phi_g^{(\mathbf{p})} = \pi d_{\mathbf{p}}^2 \lambda_g \left( \frac{\partial T_g}{\partial r} \right)$ , le flux de chaleur de conduction dans le gaz.

Ces termes sont intégrés dans le solveur phase dispersée SPARTE de CEDRE, qui ne sera cependant pas utilisé dans le cadre de cette thèse.

### 3.2.3.3. Méthodes eulériennes

Dans le cadre de méthodes eulériennes, on définit par  $\mathcal{M}_{i,j,k,l,m}$  le moment d'ordre  $i, j, k$  de la fonction  $\mathcal{F}$  en vitesse  $(u_x, u_y, u_z)$ , d'ordre  $l$  en taille et d'ordre  $m$  en température :

$$\mathcal{M}_{i,j,k,l,m} = \int_{u_x} \int_{u_y} \int_{u_z} \int_s \int_T u_x^i u_y^j u_z^k s^l T^m \mathcal{F}(t, x, u, s, T) dT ds du_x du_y du_z . \quad (3.113)$$

En intégrant l'Equation 3.103, on obtient une équation sur les moments et des hypothèses doivent être réalisées pour pouvoir fermer le système (Sibra [2015]). Pour simplifier la résolution, on commence par présumer les distributions en vitesse et en température pour obtenir un système dit semi-cinétique. Laurent et Massot [2001] proposent une distribution en vitesse et température sous forme de gaussienne :

$$f_{\text{gauss}}(\xi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\xi - \mu}{\sigma} \right)^2 \right] , \quad (3.114)$$

avec  $\mu$  l'espérance et  $\sigma$  l'écart type. En effet, cette simplification du problème permet de concentrer l'effort de modélisation sur l'espace des tailles qui est de plus grande importance au vu du large spectre de tailles de gouttes observées sur les applications visées (Chapitre 2) :

$$\mathcal{F}(t, x, u, s, T) = \phi_n(t, x, s) f_u(t, x, u, s) f_T(t, x, s, T) , \quad (3.115)$$

où  $f_u(t, x, u, s)$  et  $f_T(t, x, s, T)$  sont les densités de probabilité de vitesse et de température et  $\phi_n(t, x, s)$  la distribution en taille. Modéliser ces distributions sous forme d'une loi normale nécessite cependant de transporter des moments d'ordre 1 (espérance  $\mu = \bar{u}$  ou  $\mu = \bar{T}$  mais aussi ceux d'ordre 2 reliés à l'écart type de la vitesse et de la température. Les équations du moment donnant seulement accès aux moments d'ordre 1, retrouver les moments d'ordre supérieurs engendrerait des coûts de calcul supplémentaires. Une hypothèse courante est de considérer une mono-dispersion en vitesse et en température ce qui se traduit par une expression de  $f_u$  et  $f_T$  sous forme de diracs :

$$\mathcal{F}(t, x, u, s, T) = \phi_n(t, x, s) \delta[u - \bar{u}(t, x, s)] \delta[T - \bar{T}(t, x, s)] . \quad (3.116)$$

Il faut cependant noter que l'hypothèse de mono-dispersion de la vitesse et de la température mène à un système faiblement hyperbolique. Cette caractéristique peut faire apparaître des  $\delta$ -chocs qui ont été étudiés par Le Touze [2015], et des solutions ont été proposées pour reconstruire une poly-dispersion en vitesse à partir de moments d'ordre 1 (Doisneau [2013]). Pour la suite on fait quand même l'hypothèse d'une mono-dispersion en vitesse dont la validité peut être caractérisée par un nombre de Stokes donnant la réponse d'une particule à l'entraînement par la phase porteuse :

$$\text{St} = \frac{\mathcal{T}_p}{\mathcal{T}_g} , \quad (3.117)$$

avec  $\mathcal{T}_p$  le temps caractéristique des particules et  $\mathcal{T}_g$  le temps caractéristique de la phase porteuse gazeuse. Pour toutes les particules du spray vérifiant  $\text{St} \ll 1$ , alors elles suivent instantanément la phase porteuse et l'hypothèse d'une mono-dispersion en vitesse est justifiée. Dans le cas contraire, si certaines particules vérifient  $\text{St} \gg 1$  alors elles sont peu sensibles à la phase porteuse et ont donc une vitesse différente de la phase porteuse ainsi que des particules vérifiant  $\text{St} \ll 1$ . Dans ce cas là, l'hypothèse de mono-dispersion en vitesse n'est plus valide.

Enfin, la densité de probabilité en taille  $\phi_n(t, x, s)$  peut être traitée de différentes manières. Pour la première approche on fait l'hypothèse de mono-dispersion de l'espace des tailles, dont la distribution est représentée sur la Figure 3.12 (a) :

$$\phi_n(t, x, s) = \phi(t, x) \phi_s(s, x) = \phi(t, x) \delta[s - \bar{s}(t, x)] . \quad (3.118)$$

Afin de permettre une poly-dispersion de l'espace des tailles nécessaire à la simulation de spray évaporant, l'approche multi-classes consiste à considérer  $\phi_s$  comme une somme de distributions de diracs (Figure 3.12 (b)) :

$$\phi_s(t, x, s) = \sum_k n^{(k)}(t, x) \delta \left[ s - \bar{s}^{(k)}(t, x) \right] , \quad (3.119)$$

avec  $n^{(k)}(t, x)$  la densité numérique de la classe  $k$  et  $\bar{s}^{(k)}(t, x)$  la taille moyenne des particules de la classe  $k$ . La troisième approche est de considérer une discrétisation continue par morceaux de la distribution en taille en  $N_{cl}$  classes :

$$\phi_s(t, x, s) = \sum_{k=1}^{N_{cl}} \phi^{(k)}(t, x) , \quad (3.120)$$

où  $\phi^{(k)}$  est la distribution associée à la section  $k$ . On peut aussi considérer des distributions continues, plusieurs variantes de formes de distributions sont disponibles dans la littérature. La méthode OSM (*One Size Moment*) de Laurent et Massot [2001] utilise une distribution constante par classe et est tracée sur la Figure 3.12 (c). Les méthodes d'ordre 2 ou TSM (*Two Size Moment*) permettent une reconstruction affine (Sibra *et al.* [2017], Figure 3.12 (d)) ou exponentielle (Dufour [2005], Figure 3.12 (e)) de la distribution de taille dans chaque classe. Des méthodes d'ordre plus élevé existent, notamment d'ordre 4 par Massot *et al.* [2010]. Dans le cas de distributions continues, contrairement de la méthode multi-classes, les sections ne sont pas indépendantes. Des gouttes peuvent migrer d'une section à une section voisine par différents phénomènes physiques comme l'évaporation, la fragmentation ou la coalescence. Ces phénomènes apparaissent comme des termes sources et seront explicités dans la suite de cette section.

Dans le solveur phase dispersée eulérienne SPIREE du code multiphysique CEDRE est choisie une reconstruction affine, car elle donne une précision suffisante pour un coût de calcul raisonnable. De plus, on néglige la coalescence entre les sections, on prend en compte l'action de potentielles forces volumiques extérieures, et on ne considère pour l'instant pas de terme d'atomisation avec la phase porteuse (qui est composée uniquement de gaz). Ainsi, en reprenant les notations de Le Touze [2015] le système d'équations issu du système semi-cinétique devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (n^{(k)} u^{(k)}) &= \widehat{\Gamma}_1^{(k)} + \mathcal{N}_+^{(k)} - \mathcal{N}_-^{(k)} , \\ \frac{\partial \alpha^{(k)} \rho_0^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} u^{(k)}) &= \widehat{\Gamma}_2^{(k)} + n^{(k)} (\mathcal{E}_+^{(k)} - \mathcal{E}_-^{(k)} - \dot{m}_v^{(k)}) , \\ \frac{\partial \alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} u^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} u^{(k)} \otimes u^{(k)}) &= \widehat{\Gamma}_3^{(k)} + n^{(k)} F_{\text{drag}}^{(k)} + \alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} f \\ &+ n^{(k)} (u^{(k+1)} \mathcal{E}_+^{(k)} - u^{(k)} \mathcal{E}_-^{(k)} - u^{(k)} \dot{m}_v^{(k)}) , \quad (3.121) \\ \frac{\partial \alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} e_{\text{tot}}^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} e_{\text{tot}}^{(k)} u^{(k)}) &= \widehat{\Gamma}_4^{(k)} + n^{(k)} F_{\text{drag}}^{(k)} \cdot u^{(k)} + \alpha^{(k)} \rho_0 f \cdot u^{(k)} \\ &+ n^{(k)} \Phi_c^{(k)} \\ &+ n^{(k)} (e_{\text{tot}}^{(k+1)} \mathcal{E}_+^{(k)} - e_{\text{tot}}^{(k)} \mathcal{E}_-^{(k)} - e_{\text{tot}}^{(k)} \dot{m}_v^{(k)}) , \end{aligned}$$

avec  $n^{(k)}$  la densité numérique de gouttes,  $e_{\text{tot}}^{(k)}$  est l'énergie totale massique des gouttes,  $\alpha^{(k)}$  la fraction volumique de gouttes de la section  $k$  donnée par :



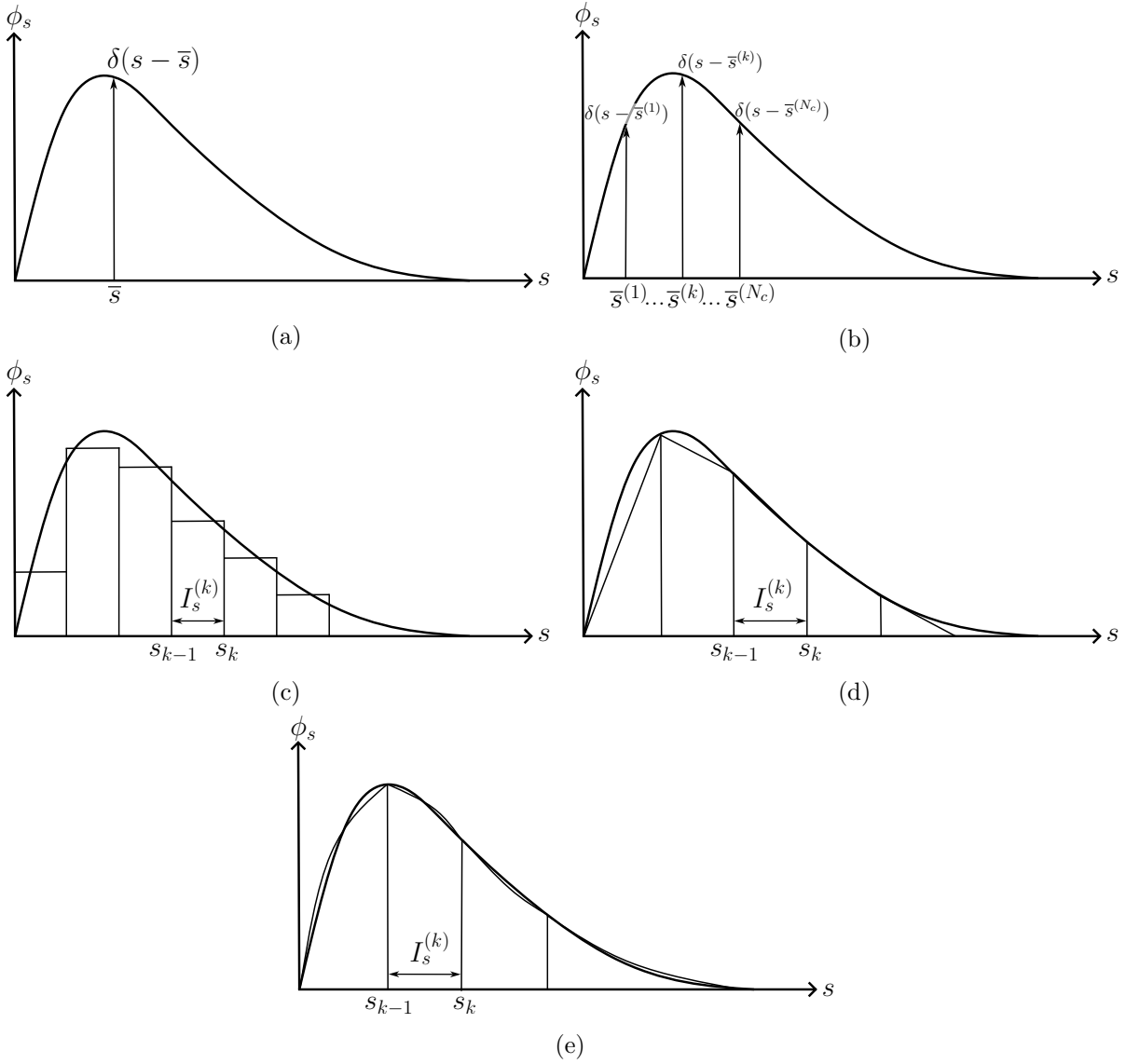


FIGURE 3.12. – Distribution en taille des méthodes sectionnelles (a) monodisperse, (b) polydisperse, (c) OSM, (d) TSM linéaire et (e) TSM exponentiel

$$\alpha^{(k)} = \frac{\rho^{(k)}}{\rho_0}, \quad (3.122)$$

où  $\rho_0$  est la masse volumique des particules à la température de référence  $T_0$ . Enfin, les termes sources du membre de droite des équations du système 3.121 désignent :

- $\hat{\Gamma}^{(k)}$ , les termes de fragmentation intégrés sur la section  $k$ ,
- $\dot{m}_v^{(k)}$ , le terme d'échange de masse avec la phase porteuse,
- $F_{\text{drag}}^{(k)}$ , le terme d'échange de traînée de la phase porteuse,
- $f$ , regroupant l'ensemble des forces volumiques extérieures s'exerçant sur le système,
- $\Phi_c^{(k)}$ , le terme d'échange d'énergie avec la phase porteuse,
- $\mathcal{N}_+^{(k)}, \mathcal{N}_-^{(k)}, \mathcal{E}_+^{(k)}$  et  $\mathcal{E}_-^{(k)}$ , les termes d'échanges entre sections contiguës liés à l'évaporation. Ce manuscrit traitant uniquement des configurations inertes, ces termes ne seront pas explicités. Le lecteur peut se rattacher à [Le Touze \[2015\]](#) pour avoir une description de ces termes utilisés dans le solveur SPIREE.

### Termes sources de la phase porteuse

De manière identique à la phase dispersée lagrangienne, la phase dispersée exerce sur la phase porteuse une action opposée qui se matérialise par un terme source  $S$  dans l'équation de conservation de masse, quantité de mouvement et d'énergie. Dans ce cas, le terme d'échange de masse s'écrit :

$$S_M^g = \sum_k n^{(k)} \dot{m}_v^{(k)} , \quad (3.123)$$

puis le terme de quantité de mouvement :

$$S_U = - \sum_k n^{(k)} F_{\text{drag}}^{(k)} + \sum_k n^{(k)} u^{(k)} \cdot \dot{m}_v^{(k)} , \quad (3.124)$$

et enfin le terme d'énergie :

$$S_E = - \sum_k n^{(k)} F_{\text{drag}}^{(k)} \cdot u^{(k)} + \sum_k n^{(k)} e_{\text{tot}}^{(k)} \cdot \dot{m}_v^{(k)} - \sum_k n^{(k)} \Phi_c^{(k)} . \quad (3.125)$$

#### 3.2.3.4. Interaction avec la phase porteuse

Cette section donne les expressions des termes sources liés au couplage avec la phase porteuse qui sont communs aux solveurs phase dispersée lagrangien SPARTE et eulérien SPIREE dont les équations ont été présentées dans la [Section 3.2.3.2](#) et la [Section 3.2.3.3](#).

#### Force de traînée

La principale force extérieure s'exerçant sur une particule est la traînée liée à son évolution dans la phase gazeuse. L'écoulement autour des particules n'étant pas connu, l'expression de cette force par l'intégrale du tenseur des contraintes sur la surface de la goutte ne peut être qu'approximée. Autrement, on peut exprimer cette force de manière analytique pour une sphère :

$$F_{\text{drag}} = \frac{\pi}{8} \rho d_p^2 C_{\text{drag}} \|\check{u} - u_p\| (\check{u} - u_p) , \quad (3.126)$$

avec  $d_p$  le diamètre de la particule,  $\check{u}$  la vitesse du gaz non perturbée par la particule considérée et  $C_{\text{drag}}$  le coefficient de traînée de la goutte. La corrélation la plus répandue est celle de [Schiller et Naumann \[1935\]](#) :

$$C_{\text{drag}} = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_p} \left( 1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687} \right) & \text{pour } \text{Re}_p \leq 10^3 \\ 0.44 & \text{pour } \text{Re}_p > 10^3 \end{cases} , \quad (3.127)$$

définie en fonction du nombre de Reynolds particulaire :

$$\text{Re}_p = \frac{d_p \|\check{u} - u_p\|}{\nu} . \quad (3.128)$$

#### Fragmentation

Le phénomène de fragmentation secondaire décrit dans la [Section 2.3.3](#), étendu par [Pougatch et al. \[2011\]](#) pour prendre en compte l'effet de la turbulence. On donne ainsi la fréquence caractéristique de rupture d'une goutte :

$$f_{\text{frag}} = \max_{i=\text{drag,turb}} \left\{ \min \left\{ \frac{(d - d_{\text{cr}})^3}{\mathcal{T}_{\text{frag}}^i}, \frac{100}{\mathcal{T}_{\text{frag}}^i} \right\}, \frac{1}{\mathcal{T}_{\text{frag}}^i} \right\} , \quad (3.129)$$

où  $i$  désigne soit le phénomène de turbulence (turb) soit la traînée aérodynamique (drag),  $d$  le diamètre de la goutte et  $d_{cr}$  le diamètre critique donné par l'Equation 2.36. Le temps de fragmentation lié à la traînée de la phase porteuse  $\mathcal{T}_{frag}^{drag}$  est donné dans le Paragraphe 2.3.3.1 et le temps de rupture induit par la turbulence est donné par :

$$\mathcal{T}_{frag}^t = \left( \frac{d^2}{\varepsilon_d} \right)^{1/3}, \quad (3.130)$$

où  $\varepsilon_d$  est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente de la phase dispersée, qui peut être relié au taux de dissipation d'énergie cinétique de la phase porteuse  $\varepsilon$  par  $\varepsilon_d = C_{turb}^2 \varepsilon$ , avec  $C_{turb}$  le coefficient de réponse de la turbulence du liquide dont l'expression est donnée par Viollet et Simonin [1994] :

$$C_{turb} = \left( \frac{\mathcal{T}_e^{turb}}{\mathcal{T}_e^{turb} + \mathcal{T}_e^{drag}} \right)^{1/2}, \quad (3.131)$$

avec  $\mathcal{T}_e^{drag}$  le temps caractéristique d'entraînement des particules et  $\mathcal{T}_e^{turb}$  le temps d'interaction des gouttes avec la turbulence qui sont donnés par :

$$\mathcal{T}_e^{drag} = \frac{4 \rho_d}{3 \rho} \frac{d}{C_{drag} \|u - v\|}, \quad (3.132)$$

avec  $C_{drag}$  le coefficient de traînée de la goutte donné en Equation 3.127 et pour une modélisation RANS  $k - \varepsilon$  de la turbulence :

$$\mathcal{T}_e^{turb} = \frac{3k}{2\varepsilon} \frac{C_\mu}{\sqrt{1 + C_\beta \xi^2}}, \quad (3.133)$$

où  $C_\mu$  est donné dans le Tableau 3.1,  $k$  l'énergie cinétique turbulente et  $\xi$ ,  $C_\beta$  des coefficients donnés par :

$$\begin{cases} \xi &= \frac{\|u - v\|}{\sqrt{(2/3)k}} \\ C_\beta &= 1.8 - 1.35 \left[ \frac{v \cdot (u - v)}{\|v\| \|u - v\|} \right]^2 \end{cases}. \quad (3.134)$$

Enfin, Wert [1995] donne la taille des gouttes filles  $d_f$  obtenues après le processus de fragmentation :

$$\frac{d_f}{d} = C_l We^{-1/3} \left( \frac{\mathcal{T}_{frag}^{drag} - \mathcal{T}_{init}}{\mathcal{T}^*} \right)^{2/3}, \quad (3.135)$$

où  $\mathcal{T}^*$  et  $\mathcal{T}_{init}$  sont les temps caractéristiques adimensionnés et de rupture totale donnés par l'Equation 2.32 et l'Equation 2.33.

Dufour [2005] propose de définir le terme source de fragmentation en utilisant la fréquence associée  $f_{frag}$  de l'Equation 3.129 sous la forme :

$$\Gamma(u, s) = \int_{\Omega_s} f_{frag}(u^*, s^*) \mathcal{F}(u^*, s^*) \mathcal{H}(u, s, u^*, s^*) du^* ds^* - f_{frag}(u, s) \mathcal{F}(u, s), \quad (3.136)$$

avec  $\mathcal{H}$  donnant le nombre probable de gouttes ayant une taille comprise entre  $s$  et  $s + ds$  et une vitesse entre  $u$  et  $u + du$  issues de la fragmentation d'une goutte de taille  $s$  et de vitesse  $u$ . L'espace d'intégration est  $\Omega_s = ]s, +$

— l'augmentation du nombre de gouttes de taille  $s$  par fragmentation de goutte de taille  $s^* > s$ .

- la diminution du nombre de gouttes de taille  $s$  par leur fragmentation et leur transfert vers une classe de taille inférieure.

Pour exprimer la fonction  $\mathcal{H}$ , on découple les distributions de vitesse et de taille :

$$\mathcal{H}(u, s, u^*, s^*) = g_u(u, s, u^*, s^*)g_s(s, s^*, u^*) , \quad (3.137)$$

où  $g_u$  et  $g_s$  sont respectivement les distributions en vitesse et en taille des gouttes après fragmentation. On prend l'hypothèse que le vitesse des gouttes filles est identique à celle de la goutte mère,  $g_u$  devient :

$$g_u(u, s, u^*, s^*) = \delta(u - u^*) . \quad (3.138)$$

Pour déterminer la distribution en taille des gouttes fragmentées, Dufour [2005] propose la formulation suivante :

$$g_s(s, s^*, u^*) = \phi_1(s, s^*, u^*) \exp[-\phi_2(s, s^*, u^*)] , \quad (3.139)$$

avec les fonctions  $\phi_1$  et  $\phi_2$  dépendantes du choix de la variable taille et fermées par l'Equation 3.135. Les termes sources du système 3.121 sont ensuite déterminés par intégration sur l'espace de la température et des vitesses selon la procédure décrite par Dufour [2005].

### Débit d'évaporation

Dans un milieu réactif, le flux de chaleur apporté par la combustion va entraîner l'évaporation des gouttes. La perte de masse liquide de la goutte peut s'écrire :

$$\dot{m}_v = \pi d_p \rho D_{g,k} \text{Sh} \ln(1 + B_M) , \quad (3.140)$$

ou comme une variation de surface :

$$\dot{s}_v = 4\pi \frac{d}{d_p} \rho D_{g,k} \text{Sh} \ln(1 + B_M) , \quad (3.141)$$

avec  $D_{g,k}$  le coefficient de diffusion de l'espèce  $k$  dans le gaz,  $B_M$  le nombre de Spalding massique :

$$B_M = \frac{Y_{g,k}^S - Y_{g,k}^\infty}{1 - Y_{g,k}^S} , \quad (3.142)$$

avec  $Y_{g,k}$  la fraction massique de l'espèce  $k$  à la surface de la goutte  $S$  ou à "l'infini"  $\infty$ . Et enfin, le nombre de Sherwood (Sh) ou le gradient de concentration de l'espèce vapeur adimensionné :

$$\text{Sh} = \frac{d_p}{Y_{g,k}^\infty - Y_{g,k}^S} \left( \frac{\partial Y_k}{\partial r} \right) . \quad (3.143)$$

Le nombre de Sherwood d'une goutte dans un milieu au repos est pris généralement égal à 2, et dans un cas convectif, il est estimé par les corrélations de Ranz-Marshall :

$$\text{Sh} = 2 + 0.57 \text{Re}_p^{1/2} \text{Sc}^{1/3} , \quad (3.144)$$

avec  $\text{Sc}$  le nombre de Schmidt de la vapeur, ou d'Abramzon-Sirignano :

$$\text{Sh} = 1 + \max\left(1, \text{Re}_p^{0.077}\right) (1 + \text{Re}_p \text{Sc})^{1/3} . \quad (3.145)$$

Pour prendre en compte l'épaississement de la couche limite autour de la goutte causé par son évaporation, Abramzon et Sirignano [1989] introduisent un nombre de Sherwood modifié :

$$\text{Sh}^* = 2 + \frac{\text{Sh} - 2}{F_M(B_M)} , \quad (3.146)$$

avec

$$F_M(B_M) = (1 + B_M)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M}. \quad (3.147)$$

### Flux de chaleur

Le flux de chaleur entre la goutte et l'environnement gazeux est estimé par une équation de conservation de l'énergie intégrée sur la goutte. En prenant l'hypothèse d'une conduction infinie dans la goutte on a :

$$\Phi_c = \frac{\dot{m}_v}{B_T} c_{pk} (T_\infty - T_S) - \dot{m}_v L_v (T_S), \quad (3.148)$$

avec :

- $\dot{m}_v = \pi d_p \frac{\lambda_g}{c_{pk}} \nu \ln(1 + B_T)$ , le débit massique d'évaporation
- $\lambda_g$ , le coefficient de conduction dans le gaz
- $k$ , l'indice de l'espèce évaporante
- $L_v$ , la chaleur latente de vaporisation
- $B_T$ , le nombre de Spalding thermique défini par :  $B_T = \frac{c_{pk} (T_\infty - T_S)}{L_v + \frac{\dot{Q}_p}{\dot{m}_p}}$
- $T_S$  la température de surface de la goutte

### Comparaison des approches phase dispersée eulériennes et lagrangiennes

Le [Tableau 3.4](#) donne la comparaison des approches phases dispersées lagrangiennes et eulériennes. Le choix d'une méthode dépend de l'application visée et du compromis coût/précision. Pour la modélisation d'un spray dans les conditions moteur fusée, [Le Touze \[2015\]](#) et [Rutard \[2019\]](#) ont choisi l'approche eulérienne qui propose un couplage naturel avec la phase porteuse et permet de limiter les coûts de calcul pour représenter un grand nombre de structures ayant une taille variée.

#### 3.2.4. Approche multi-échelles

Pour l'instant on a considéré les approches des modèles de simulation diphasique à reconstruction d'interface, à interface diffuse et à phase dispersée cinétique de manière disjointe. Le [Tableau 3.5](#) compare les différentes méthodes présentées dans les sections [3.2.1](#), [3.2.2](#) et [3.2.3](#). Les méthodes à reconstruction d'interface, bien que très précises notamment pour les phases séparées et en particulier pour la déstabilisation du cœur liquide, ne sont pas très adaptées à la phase dispersée ni à un éventuel couplage avec une méthode cinétique pour la résoudre. A l'inverse, les méthodes cinétiques sont très adaptées à la résolution de la phase dispersée mais comme elles ne considèrent pas les phases séparées, elles ne permettent pas de simuler la zone mixte ni la transition vers la phase séparée (il est nécessaire d'injecter directement des gouttes dans le domaine). Enfin, les méthodes à interface diffuse permettent la description des grandes échelles du cœur liquide si la diffusion est numériquement maîtrisée, et sont adaptées à modéliser un passage vers une phase dispersée : en effet, si on considère un écoulement atomisant résolu sur un maillage de type LES, dont la taille de maille est bien plus importante que les plus petites gouttes, la solution interface diffuse répartit la masse liquide dans un ensemble de cellules à faible taux de présence volumique de liquide. Cela s'approche des hypothèses d'un écoulement à phase dispersée, ce qui favorise une transition vers ce type de modélisation.

En l'état des choses, aucune stratégie ne permet de simuler efficacement l'ensemble des échelles d'un écoulement diphasique atomisant, de la déstabilisation du cœur liquide, à la phase dispersée composée de très petites gouttes dans une configuration applicative.

Méthodes lagrangiennes	Méthodes eulériennes
Avantages	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Traitement naturel des modèles à l'échelle de la goutte</li> <li>• Traitement naturel des trajectoires</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Couplage naturel avec la phase porteuse eulérienne</li> <li>• Coût de calcul indépendant du nombre de gouttes modélisées</li> <li>• Facilité de mise en œuvre sur des calculs parallèles</li> </ul>
Inconvénients	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Coût élevé si besoin d'un grand nombre de particules</li> <li>• Couplage délicat avec la phase porteuse (projection de termes ponctuels sur une grille eulérienne)</li> <li>• Suivi des particules en parallèle</li> <li>• Équilibrage de la charge calcul parallèle</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Complexité des modèles et des méthodes numériques pour augmenter la précision (polydispersion taille, vitesse, température)</li> <li>• Problèmes numériques possibles (hyperbolicité faible, <math>\delta</math>-chocs)</li> </ul>

TABLE 3.4. – Avantages et inconvénients des méthodes phase dispersée lagrangiennes et eulériennes, Le Touze [2015]

Pour pallier à la difficulté de simuler une grande variété d'échelles représentée sur la [Figure 3.2](#), des méthodes hybrides ont été développées en combinant les avantages de différentes modélisations. Plusieurs couplages sont possibles mais on se concentre sur le plus simple de mise en œuvre entre une méthode à interface diffuse pour décrire les phases séparées ainsi que la zone mixte, et une méthode cinétique pour simuler la phase dispersée. C'est ce choix qui a été effectué dans CEDRE pour la modélisation d'un jet atomisant avec les solveurs CHARME pour la zone de phases séparées (SPS pour *Separated Phases Solver*), SPIREE pour la phase dispersée (DPS pour *Dispersed Phase Solver*) eulérienne et SPARTE dans le cas d'une phase dispersée lagrangienne. Le transfert de fluide (masse, quantité de mouvement et énergie) entre les solveurs SPS et DPS est réalisé par des termes sources. En plus des termes d'interactions avec la phase porteuse décrits dans la [Section 3.2.3.4](#), deux phénomènes physiques supplémentaires doivent être pris en compte et sont illustrés sur la [Figure 3.13](#) :

- L'atomisation primaire, simulant un transfert de masse liquide du SPS vers le DPS lorsque les structures liquides sont sous-résolues par le SPS.
- La pseudo-coalescence qui caractérise l'interaction entre les gouttes du DPS et des structures liquides résolues par le SPS (par exemple lors de l'impact de gouttes du SPS sur le cœur liquide).

Le système d'équations couplant la phase séparée à interface diffuse à la phase dispersée avec une méthode cinétique eulérienne devient :

Reconstruction d'interface	Interface diffuse	Méthodes cinétiques
Exemples de modèles		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Front tracking</li> <li>• VoF géométrique</li> <li>• Level Set</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modèle général homogénéisé à 7 équations</li> <li>• Modèles relaxés à 6, 5, 4 ou 3 équations</li> <li>• VoF algébrique ou modèle de Cahn-Hillard</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Méthodes lagrangiennes</li> <li>• Méthodes eulériennes</li> </ul>
Topologie d'écoulement diphasique		
<ul style="list-style-type: none"> <li>✓✓ Phase séparée</li> <li>✓ Mixte</li> <li>× Phase dispersée</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Phase séparée</li> <li>✓ Mixte</li> <li>✓ Phase dispersée</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>× Phases séparées</li> <li>× Mixte</li> <li>✓✓ Phase dispersée</li> </ul>
Points forts		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grande précision</li> <li>• Localisation de l'interface évidente</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ecoulements compressibles et réactifs directs</li> <li>• Extensible à un nombre quelconque de phases</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Représentation de toute les échelles du spray</li> <li>• Coût de calcul indépendant de la poly-dispersion</li> </ul>
Points faibles		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Reconstruction de l'interface complexe (3D non structuré)</li> <li>• Conservation de la masse et de la quantité de mouvement</li> <li>• Difficultés écoulements compressible, réactif et pour prendre en compte plus de 2 phases</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fermeture des termes interfaciaux</li> <li>• Robustesse thermodynamique du mélange</li> <li>• Localisation et interprétation de l'interface complexe</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Nécessite un modèle pour injecter le spray dans le domaine de calcul</li> </ul>

 TABLE 3.5. – Avantages et inconvénients des méthodes numériques pour décrire un écoulement diphasique atomisant, complété de [Le Touze \[2015\]](#)

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i u) = -\nabla \cdot J_i + \dot{\omega}_i \quad 1 \leq i \leq N_g - 1 \\
 \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i u) = -\nabla \cdot J_i + \dot{\omega}_i + S_M^g \quad i = N_g \\
 \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i u) = -\nabla \cdot J_i + S_M^l \quad i = N_{\text{tot}} - 1 \\
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = \nabla \cdot [\tau - (\tau_{\text{capil}} + pI)] + \rho f + S_U \\
 \frac{\partial e_{\text{tot}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_{\text{tot}} u) = \nabla \cdot [(\tau - (\tau_{\text{capil}} + pI)) \cdot u] - \nabla \cdot J_{e_{\text{tot}}} + \rho f \cdot u
 \end{array} \right. \quad (3.149)$$

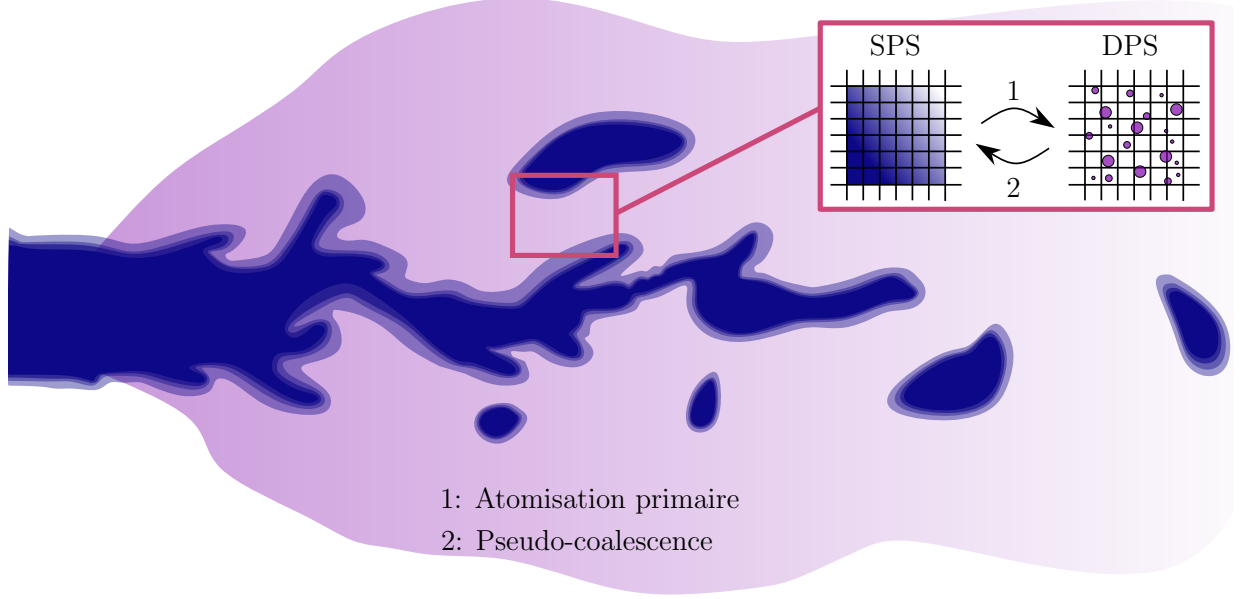


FIGURE 3.13. – Schématisation du couplage entre le SPS et le DPS

et

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial n^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (n^{(k)} u^{(k)}) = \widehat{\Gamma}_1^{(k)} + \mathcal{N}_+^{(k)} - \mathcal{N}_-^{(k)} + P_N^{(k)} \\
 \frac{\partial \alpha^{(k)} \rho_0^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} u^{(k)}) = \widehat{\Gamma}_2^{(k)} + n^{(k)} (\mathcal{E}_+^{(k)} - \mathcal{E}_-^{(k)} - \dot{m}_v^{(k)}) + P_M^{(k)} \\
 \frac{\partial \alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} u^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} u^{(k)} \otimes u^{(k)}) = \widehat{\Gamma}_3^{(k)} + n^{(k)} F_{\text{drag}}^{(k)} + \alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} f + P_V^{(k)} \\
 \quad + n^{(k)} (u^{(k+1)} \mathcal{E}_+^{(k)} - u^{(k)} \mathcal{E}_-^{(k)} - u^{(k)} \dot{m}_v^{(k)}) \\
 \frac{\partial \alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} e_{\text{tot}}^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^{(k)} \rho_0^{(k)} e^{(k)} u^{(k)}) = \widehat{\Gamma}_4^{(k)} + n^{(k)} F_{\text{drag}}^{(k)} \cdot u^{(k)} + P_E^{(k)} \\
 \quad + \alpha^{(k)} \rho_0 f \cdot u^{(k)} + n^{(k)} \Phi_c^{(k)} \\
 \quad + n^{(k)} (e_{\text{tot}}^{(k+1)} \mathcal{E}_+^{(k)} - e_{\text{tot}}^{(k)} \mathcal{E}_-^{(k)} - e_{\text{tot}}^{(k)} \dot{m}_v^{(k)})
 \end{array} \right. \quad (3.150)$$

avec  $S_M^l$ ,  $S_U$  et  $S_E$  les termes de couplage côté SPS et  $P_N^{(k)}$ ,  $P_M^{(k)}$ ,  $P_V^{(k)}$  et  $P_E^{(k)}$  les termes de couplage côté DPS. Chacun de ces termes peut être décomposé en un terme d'atomisation primaire  $A$  et un terme de pseudo-coalescence  $C$ . Par exemple pour le terme de masse :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 P_M^{(k)} = P_{M_A}^{(k)} - P_{M_C}^{(k)} , \\
 S_M^l = S_{M_C}^l - S_{M_A}^l ,
 \end{array} \right. \quad (3.151)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l}
 S_{M_A}^l = \sum_k P_{M_A}^{(k)} , \\
 S_{M_C}^l = \sum_k P_{M_C}^{(k)} .
 \end{array} \right. \quad (3.152)$$



Pour le solveur SPS, la coalescence est un terme source positif (car il apporte de la masse issue du DPS) et le terme d'atomisation primaire négatif (transfert de masse vers le DPS). On peut remarquer que les termes sources sont de signes opposés dans le SPS et que la somme des termes sources entre le SPS et le DPS est nulle afin de conserver la masse globale du système. La même formulation des termes sources est donnée pour les termes des équations de quantité de mouvement et d'énergie.

### 3.2.4.1. Modélisation de l'atomisation primaire

Le terme source d'atomisation primaire modélisé par [Le Touze \[2015\]](#) est donné par :

$$S_{MA}^l = \rho Y_l f_A \lambda_A(Y_l) , \quad (3.153)$$

avec  $Y_l$  la fraction massique de l'espèce liquide,  $f_A$  la fréquence caractéristique du phénomène d'atomisation primaire et  $\lambda_A$  la fonction d'efficacité du terme source d'atomisation primaire. Il a été choisi de relier la fréquence caractéristique d'atomisation à la fréquence turbulente  $f_{\text{turb}}$  représentant l'intensité du gradient de vitesse local :

$$f_A = f_{\text{turb}} = |S_{ij}| , \quad (3.154)$$

où  $S_{ij}$  est le tenseur des efforts résolus dont l'expression est donnée dans l'[Equation 3.33](#). Enfin, la fonction d'efficacité  $\lambda_A$  a pour objectif de localiser l'atomisation primaire dans des zones où la fraction volumique de liquide est faible. En effet, le transfert de masse du SPS vers le DPS doit être effectué dans la phase dispersée. Dans le cas où une grande partie du volume de la cellule est remplie de gaz, alors la variation de pression causée par le transfert de masse liquide vers le DPS est minime. On utilise ainsi la diffusion de l'interface pour transférer de la masse vers le DPS dans les zones de faible fraction massique de liquide en formulant la fonction d'efficacité proportionnellement à cette quantité :

$$\lambda_A(l) = 1 + \tanh(4Y_l^2) , \quad (3.155)$$

Cette fonction est tracée sur la [Figure 3.14](#) pour l'ensemble des valeurs de fraction massique.

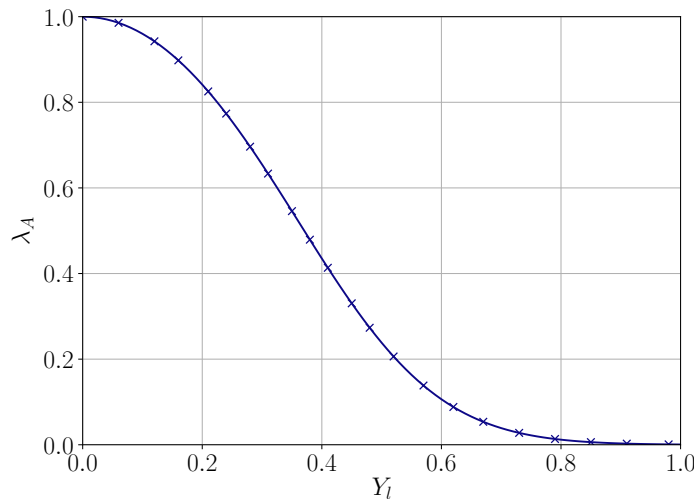


FIGURE 3.14. – Fonction d'efficacité du terme source d'atomisation primaire  $\lambda_A$

Une fois la masse transférée dans le DPS, il faut la modéliser sous forme de gouttes sphériques avec des propriétés physiques qui restent à définir : la taille, la vitesse, et la température. Plusieurs descriptions de ces propriétés sont possibles et représentées sur la [Figure 3.15](#) :

- Moyennes, uniformes dans tout le domaine et constantes dans le temps. C'est le cas le plus simple, on peut se servir des grandeurs globales de l'écoulement ( $We$ ,  $Re$ , ...) ainsi que de corrélations expérimentales (Section 2.3) pour déterminer les caractéristiques moyennes du spray.
- Distribuées, uniformes dans tout le domaine et constante dans le temps. C'est une approche semblable à la précédente en considérant une distribution des variables autour de la moyenne.
- Moyennes, dynamiques dépendant des conditions locales de l'écoulement.
- Distribuées, dynamiques dépendant des conditions locales de l'écoulement.

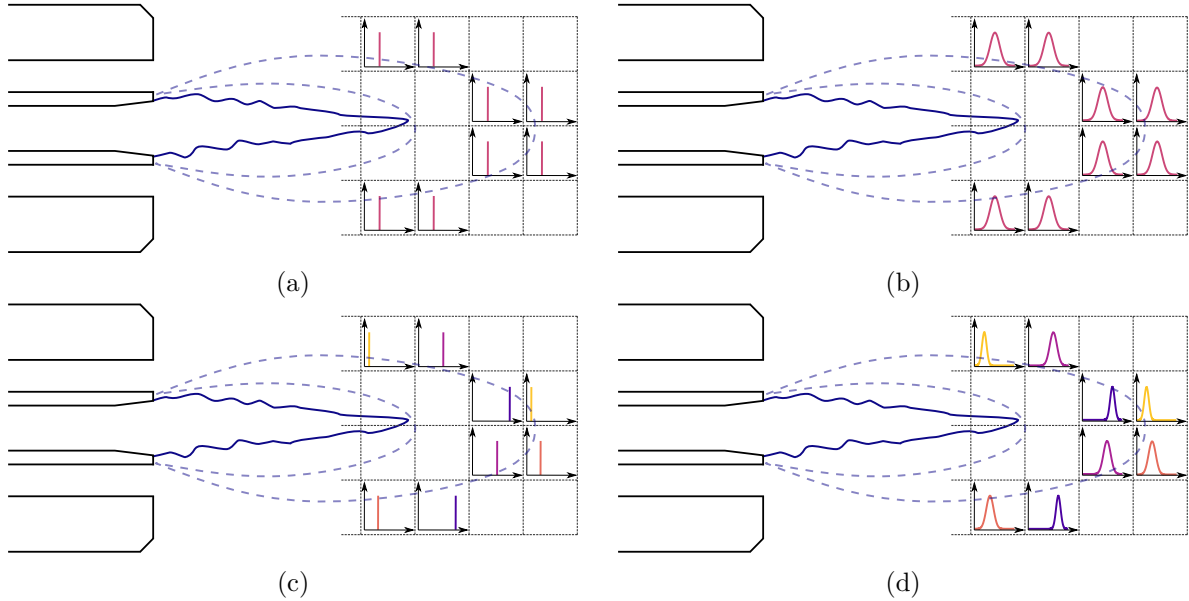


FIGURE 3.15. – Propriétés des gouttes transférées dans le SPS : a) Moyennes uniformes et constantes, b) Distribuées uniformes et constantes, c) Moyennes dynamiques, d) Distributions dynamiques, Le Touze [2015]

L'homogénéisation et les hypothèses de relaxation définies dans la Section 3.2.2.2 ne donnent pas suffisamment d'informations pour déterminer tous ces paramètres. Ainsi, dans un premier temps, Le Touze [2015] et Rutard [2019] prennent les hypothèses suivantes :

- La température des gouttes "atomisées"  $T_{\text{atom}}$  dans le DPS est prise uniforme et constante dans le temps, égale à la température locale du SPS
- A minima la direction de la vitesse des gouttes "atomisées" dans le DPS est identique au vecteur vitesse du mélange du SPS. La norme de la vitesse peut être soit prise comme celle de l'écoulement local, soit imposée à partir de corrélations expérimentales. La vitesse d'atomisation  $u_{\text{atom}}$  s'écrit donc :

$$u_{\text{atom}} = \|u_{\text{atom}}\| \frac{u}{\|u\|} . \quad (3.156)$$

- Le diamètre d'atomisation  $d_{\text{atom}}$  est imposé uniforme et constant dans le temps.

Les tailles des classes du SPS sont ensuite choisies pour que le diamètre d'atomisation se situe dans la classe contenant les plus grandes gouttes. Ceci entraîne :

$$\begin{cases} P_{MA}^{(k)} = 0 & k < N_{\text{cl}} , \\ P_{MA}^{(k)} = -S_{MA}^l & k = N_{\text{cl}} . \end{cases} \quad (3.157)$$

Cette dernière hypothèse est la plus forte pour les écoulements étudiés dans cette thèse. En effet, pour les mêmes raisons qui ont mené à la discrétisation de l'espace des tailles du DPS, l'effort de modélisation doit être mis sur la description de la taille des gouttes lors de leur atomisation.

Une des pistes possibles est d'ajouter une équation de densité d'aire interfaciale décrivant le plissement de l'interface diphasique et permettant de remonter à une taille de structure locale. Les modélisations proposées dans la littérature ainsi qu'une nouvelle modélisation adaptée aux configurations étudiées dans cette thèse seront présentées dans le [Chapitre 6](#).

### 3.2.4.2. Pseudo-coalescence

La modélisation de la pseudo-coalescence proposée par [Le Touze \[2015\]](#) est très similaire au terme d'atomisation. Le terme est défini pour chaque classe  $k$  du solveur SPS par :

$$P_{MC}^{(k)} = \rho^{(k)} f_C \lambda_C (\alpha_l) , \quad (3.158)$$

avec  $f_C$  la fréquence caractéristique du phénomène de pseudo-coalescence,  $\lambda_C$  la fonction d'efficacité du terme de coalescence et  $\alpha_l$  la fraction volumique du liquide. La fréquence caractéristique du phénomène de pseudo-coalescence est prise comme un temps caractéristique de l'écoulement et donc comme l'inverse du pas de temps d'intégration des termes sources. Enfin, pour la fonction d'efficacité, la contrainte numérique est identique au terme d'atomisation mais le terme décrivant une interaction avec la phase dense, un compromis doit être trouvé. [Le Touze \[2015\]](#) propose la formulation suivante :

$$\lambda_C(\alpha_l) = 1 - \tanh(-2 \log \alpha_l) , \quad (3.159)$$

illustré sur la [Figure 3.16](#).

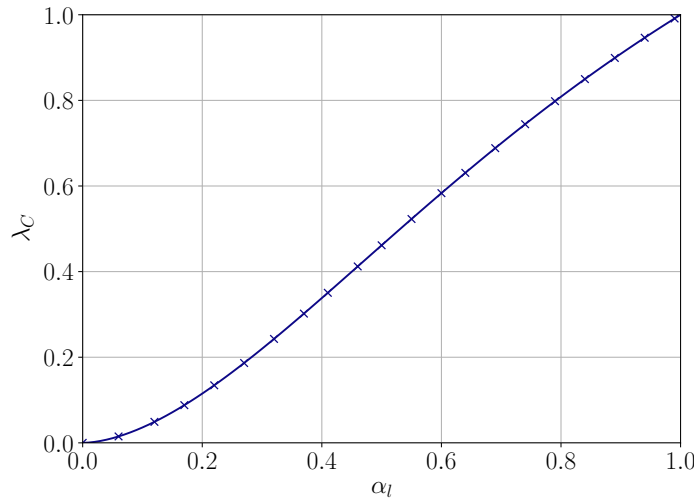


FIGURE 3.16. – Fonction d'efficacité du terme source de pseudo-coalescence  $\lambda_C$

## Termes sources des équations de quantité de mouvement et d'énergie

Les termes sources du couplage entre le SPS et le DPS des équations de quantité de mouvement et d'énergie peuvent être déduits à partir des termes déterminés précédemment. Comme pour le terme source de l'équation de masse, seul le terme de la section des plus grosses gouttes est non nul, pour  $k = N_{cl}$ . Pour le terme d'atomisation on a :

$$\begin{cases} P_{N_A}^{(N_{cl})} = P_{M_C}^{(N_{cl})} \frac{6}{\rho_0 T_{atom} \pi d_{atom}^3} , \\ P_{U_A}^{(N_{cl})} = P_{M_C}^{(N_{cl})} u_{atom} , \\ P_{E_A}^{(N_{cl})} = P_{M_C}^{(N_{cl})} \left[ c_p T_{atom} + \frac{1}{2} u_{atom} \cdot u_{atom} \right] . \end{cases} \quad (3.160)$$

et pour le terme de coalescence, de manière similaire :

$$\begin{cases} P_{N_C}^{(N_{cl})} = P_{M_C}^{(N_{cl})} \frac{6}{\rho_0 T^{(N_{cl})} \pi d^{(N_{cl})^3} , \\ P_{U_C}^{(N_{cl})} = P_{M_C}^{(N_{cl})} u^{(N_{cl})} , \\ P_{E_C}^{(N_{cl})} = P_{M_C}^{(N_{cl})} \left[ c_p T^{(N_{cl})} + \frac{1}{2} u^{(N_{cl})} \cdot u^{(N_{cl})} \right] . \end{cases} \quad (3.161)$$

### 3.3. Bilan sur les codes disponibles

Dans cette thèse deux approches numériques venant de deux codes calcul seront utilisés. Le [Tableau 3.6](#) présente les principales différences entre les deux codes. Le code DyJeAT utilise une stratégie DNS à la fois pour la turbulence et pour les échelles diphasiques avec une reconstruction de l'interface. Il permet de réaliser des simulations de configurations inertes dans un domaine limité, mais permet de résoudre l'ensemble des échelles diphasiques. De part ces caractéristiques, ce code permet de réaliser des simulations de référence qui seront présentées dans la [Section 4.4](#). Le code multi-physique CEDRE utilise une stratégie LES pour la turbulente et multi-échelles pour le diphasique avec le couplage décrit dans la [Section 3.2.4](#). Il permet de réaliser des simulations de l'injection du spray en conditions froides ou réactives, avec modélisation de la turbulence et de l'atomisation. Ainsi il peut couvrir une plus grande plage d'écoulements pour des applications industrielles.

L'objectif de cette thèse est de contribuer à la modélisation du phénomène d'atomisation primaire du code CEDRE sur plusieurs points :

1. Introduction d'une modélisation du diamètre des gouttes atomisées.
2. Quantification des échelles de coupure diphasiques introduites par le filtrage LES dans le [Chapitre 5](#).
3. Utilisation du premier point pour compléter le couplage entre modèles phase dense et dispersée dans le [Chapitre 6](#) en utilisant une approche par densité d'aire interfaciale.

	DyJeAT	CEDRE
Turbulence	DNS	LES
Interface	Reconstruite	Diffuse
Spectre diphasique	Résolution de toutes les échelles	<u>Grandes échelles</u> : Baer-Nunziato relaxé à 4 équations (Section 3.2.2.3) <u>Sous maille</u> : Méthode cinétique eulérienne (Section 3.2.4)
Maillages	Cartésien uniforme	Non structuré
Écoulements compressibles	Non	Oui
Réactif	Non	Oui

TABLE 3.6. – Comparaison des méthodes et applications des codes DyJeAT et CEDRE

## Bilan

Ce chapitre fait la synthèse des principales modélisations considérées dans ce travail pour la simulation des écoulements diphasiques présentées dans le [Chapitre 2](#). Dans un premier temps, les équations de Navier-Stokes monophasiques ont été présentées avec les moyennes de Reynolds et de Favre permettant leur résolution pratique pour un écoulement turbulent. La suite du chapitre est consacrée à l’extension des équations de Navier-Stokes pour les écoulements diphasiques. Les méthodes à interfaces reconstruites sont tout d’abord présentées : cette méthode est intégrée dans le code DyJeAT qui sera utilisé dans la suite de cette thèse pour réaliser des simulations de référence. Dans un second temps, les méthodes à interfaces diffuses sont introduites et plus en particulier l’implémentation dans le module CHARME de CEDRE. Ensuite, les méthodes phase dispersée cinétique utilisées dans le solveur SPARTE et SPIREE. Enfin, le couplage entre les solveurs phases séparées et phase dispersée sont explicités ainsi que les hypothèses associées. Le chapitre est conclu par un bilan sur les codes disponibles, leur utilisation dans la suite du manuscrit et les points d’apports de cette thèse pour la modélisation de l’atomisation dans le code CEDRE.

# Caractéristiques de la configuration coaxiale

L’objectif de ce chapitre est de présenter la démarche globale d’étude menant au choix d’une configuration coaxiale qui sera utilisée tout au long de cette thèse, ainsi que les simulations de référence et leurs principaux résultats.

Dans un premier temps, la démarche d’étude de cette thèse impliquant à la fois des simulations DNS et LES est décrite. Afin de développer une modélisation LES précise du phénomène d’atomisation, des simulations haute-fidélité servent à produire des résultats de référence.

Dans un second temps, différents points de fonctionnement d’injection coaxiale sont présentés. Les raisons du choix de la configuration pour une étude numérique, adaptée d’une expérience disponible dans la littérature, sont détaillées.

Enfin, les simulations DNS du point de fonctionnement sélectionné, réalisées par [Hoarau et al.](#) [(soumis)] sont introduites. Les résultats de ces simulations ont été largement utilisées dans cette thèse, permettant notamment d’évaluer par comparaison directe la qualité de la résolution des grandes échelles diphasiques par l’approche LES à interface diffuse, et de mieux distinguer les échelles diphasiques résolues et modélisées dans l’approche multi-échelles présentée dans le [Chapitre 5](#). De plus, elles permettent aussi de formuler et de valider le modèle de densité d’aire interfaciale du [Chapitre 6](#).

## Sommaire

<b>4.1. Démarche d’étude</b>	<b>67</b>
<b>4.2. Choix de la configuration coaxiale</b>	<b>68</b>
4.2.1. Contraintes pour la sélection de la configuration	68
4.2.2. Points de fonctionnement	68
<b>4.3. Description de la simulation DNS</b>	<b>70</b>
<b>4.4. Résultats DNS de référence</b>	<b>71</b>
4.4.1. Outil de caractérisation d’un spray à interface reconstruite	72
4.4.1.1. Introduction de l’outil	72
4.4.1.2. Fonctionnement de l’algorithme	73
4.4.1.3. Quantification des structures liquides	73
4.4.2. Caractérisation d’un spray coaxial DNS	76
4.4.2.1. Longueur de cœur liquide	77
4.4.2.2. Analyse du spray	77
4.4.2.3. Densité d’aire interfaciale	81

## 4.1. Démarche d’étude

Cette section présente la démarche d’étude globale de cette thèse pour améliorer la modélisation de l’atomisation primaire d’oxygène liquide dans les flammes diphasiques des moteurs fusées à ergols liquides. La stratégie globale d’étude consiste à réaliser des simulations afin de caractériser le spray LES CEDRE ([Chapitre 5](#)) et de valider des modèles de sous-maille diphasiques LES ([Chapitre 6](#)).

Tout d’abord on sélectionne une configuration et un point de fonctionnement approprié au sujet d’étude de cette thèse (Section 4.2). Ensuite, une simulation DNS complète de cette configuration permet d’analyser et de comprendre l’écoulement diphasique en sortie d’injecteur, ainsi que de quantifier les grandeurs d’intérêt telles que le champ de vitesse local, la taille de goutte et leur localisation (Section 4.4.2). Pour fournir cette base de données de résultats de référence, le code DNS DyJeAT a été utilisé dans le cadre du post-doctorat de J.C. Hoarau.

Enfin, des simulations LES sont réalisées avec le code multi-physique CEDRE (présenté dans la Section 3.2.4) dans des conditions identiques aux simulations DNS de référence afin de comparer les méthodes et les sprays LES et DNS. Cette étude permet de mettre en évidence des échelles de coupure diphasiques (Chapitre 5) correspondants à des limites de résolution, à la fois de la méthode DNS à interface reconstruite et de la méthode LES à interface diffuse. Pour estimer une taille locale de structure liquide, un modèle de densité d’aire interfaciale est développé dans le Chapitre 6. Enfin, les parties résolues et modélisées du spray LES sont comparées au spray DNS ainsi qu’à des mesures expérimentales pour valider la stratégie de simulation diphasique LES CEDRE.

## 4.2. Choix de la configuration coaxiale

### 4.2.1. Contraintes pour la sélection de la configuration

Dans le Chapitre 3, nous avons présenté différentes méthodes pour simuler un jet diphasique et en particulier le phénomène d’atomisation. Avant toute chose, on se propose de choisir un cas d’étude représentatif des écoulements rencontrés dans une chambre de combustion d’un moteur fusée à ergols liquides. Quelques contraintes sont imposées pour le choix du dispositif qui doit :

- Être un injecteur coaxial rencontré dans les chambres de combustion des moteurs fusée à ergols liquides. Aucun swirl afin de concentrer l’étude strictement sur le phénomène d’atomisation du jet liquide par *airblast*. La géométrie de l’injecteur doit être simple afin de limiter le coût de calcul supplémentaire lié au maillage du système d’injection. De plus, la lèvre de l’injecteur d’épaisseur  $\delta_{lip}$  doit avoir une dimension suffisante pour pouvoir être maillée de manière convenable en LES (décrit dans la Section 5.1.1).
- Point de fonctionnement sub-critique, avec  $Re$  et  $We$  tels que l’atomisation soit en régime fibre, régime rencontré dans les moteurs fusée à ergols liquides.
- Disposer de données de validation expérimentales afin de pouvoir valider les simulations LES et DNS. En particulier, des mesures granulométriques des structures liquides du spray.
- Les espèces injectées doivent être inertes. En effet, la présence d’une flamme n’est pas nécessaire pour l’étude du phénomène d’atomisation seul.
- Afin de réaliser des simulations de référence avec le code DNS DyJeAT, le cas doit présenter des conditions qui rendent l’hypothèse d’écoulement incompressible valable, avec un nombre de Mach suffisamment petit. De plus, il ne doit y avoir ni d’évaporation, ni de réaction chimique.
- Le choix du maillage doit rendre réalisable la simulation DNS en terme de coût de calcul.

### 4.2.2. Points de fonctionnement

Plusieurs cas expérimentaux et théoriques sont identifiés pour respecter les contraintes énumérées ci-dessus. Le premier est le PF-ONERA, une injection air/eau étudiée expérimentalement par Baillot *et al.* [2009], Ficuciello *et al.* [2017] et numériquement par Rutard *et al.* [2020]. Le second est le point de fonctionnement A10 du banc Mascotte de l’ONERA, utilisant de l’oxygène liquide et de l’hydrogène gazeux, décrit dans la littérature par Fdida *et al.* [2019] et Le Touze *et al.* [2020]. Enfin, bien que ne disposant pas de mesures expérimentales, deux configurations théoriques possibles sont les cas Sirea de Nicole *et al.* [2019] et Zeph20 utilisant de l’oxygène liquide et du méthane gazeux. Les paramètres physiques de ces points de fonctionnement, dont la

pression et les principaux nombres adimensionnels sont détaillés dans le [Tableau 4.1](#). Leur régime d'atomisation est identifié par le  $Re_l$  et le  $We_g$  sur la [Figure 4.1](#) avec leur numérotation respective. Tous les points de fonctionnement envisagés appartiennent bien au régime d'atomisation fibre, étudié dans ce manuscrit.

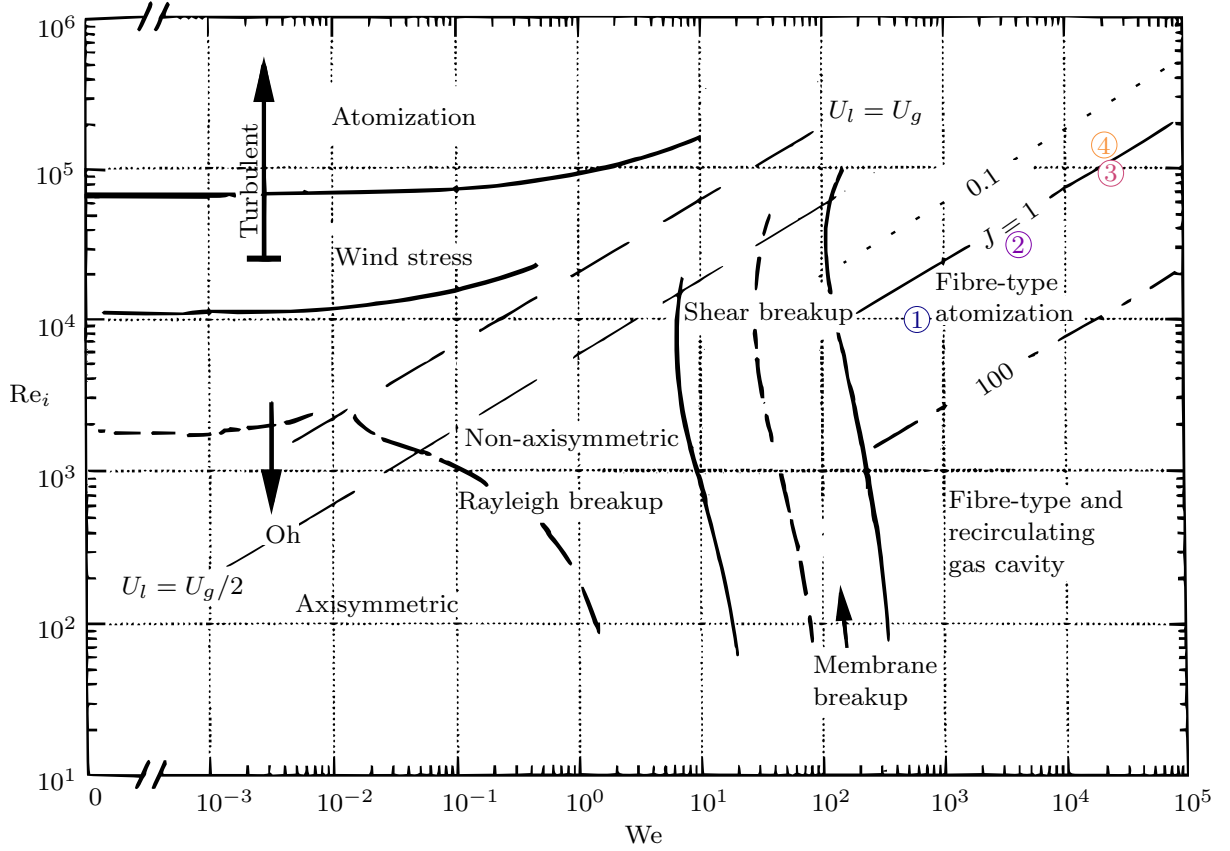


FIGURE 4.1. – Identification des régimes d'atomisation et des points de fonctionnement envisagés, issu de [Hopfinger \[1998\]](#) et [Baillot \*et al.\* \[2009\]](#)

Pour la sélection de la configuration d'étude de cette thèse, plusieurs facteurs peuvent être limitants pour réaliser la simulation de référence DNS. Le premier est le rapport de masse volumique entre le liquide et le gaz  $\mathcal{R}_\rho$ , qui pénalise la résolution de l'équation de pression et induit des problèmes de conservation de la quantité de moment par phase, augmentant drastiquement le coût de calcul d'une itération. Cette contrainte rend prohibitif le coût de calcul d'une DNS du PF-ONERA et du point A10 du banc Mascotte. Les deux points de fonctionnement au méthane n'ont pas cette contrainte avec  $\mathcal{R}_\rho$  beaucoup plus faible (63 pour Sirea et 52 pour Zeph20).

Pour réaliser une simulation DNS des configurations présentées, la taille de maille est pilotée par la plus petite échelle diphasique. Celle-ci correspond aux plus petites gouttes atomisées mais elle n'est pas connue a priori car il n'existe pas de corrélation donnant accès à cette valeur. On se base donc sur deux autres tailles caractéristiques de l'écoulement. La première est la longueur d'onde d'instabilité transverse  $\lambda_\perp$ , estimée à partir de l'[Equation 2.24](#), qui est plus petite que la seconde longueur d'onde, celle de l'instabilité longitudinale  $\lambda_\parallel$ . Pour estimer une taille de maille, on considère que 10 points sont nécessaires pour résoudre la plus petite longueur d'onde  $\lambda_\perp$ .

La taille du domaine de calcul est déterminée par une estimation de l'ordre de grandeur de la longueur de cœur liquide qui est donnée à partir de l'[Equation 2.38](#). Les dimensions du domaine sont fixées en considérant que la longueur du domaine doit être de 3 fois la longueur de cœur liquide et que la largeur du domaine est de  $5 D_1$ . En ayant connaissance de la taille de maille  $\Delta_{DNS}$  et de la taille du domaine de calcul, le nombre de mailles de chaque configuration est estimé et donné dans le [Tableau 4.1](#), dans le cadre d'utilisation d'un maillage cartésien uniforme.

Enfin, le nombre de pas de temps nécessaire au calcul est estimé en considérant que le transitoire



sera évacué en 2 traversées de cœur liquide et que les moyennes nécessitent 5 traversées de cœur liquide pour converger. La vitesse de convection du cœur liquide est déterminée par une pondération de la vitesse par le rapport de quantité de mouvement  $\mathcal{J}$  (défini dans l'Equation 2.8) :

$$U_{\text{cœur}} = \frac{U_g + \mathcal{J}U_l}{1 + \mathcal{J}}, \quad (4.1)$$

avec  $U_g$  la vitesse d'injection du gaz et  $U_l$  la vitesse d'injection du liquide.

On estime ainsi qu'une DNS peut être réalisée sur une de ces configurations pour des maillages de l'ordre de  $10^9$  mailles. Bien que cette analyse ne donne qu'un ordre de grandeur, les points de fonctionnement au méthane nécessitent 100 à 1000 fois plus de mailles que le PF- et le point A10 du banc Mascotte rendant aussi ces configurations irréalisables pour un calcul DNS.

	① PF-ONERA Ficuciello <i>et al.</i> [2017]	② Mascotte A10 Habiballah <i>et al.</i> [2006]	③ Sirea Nicole <i>et al.</i> [2019]	④ Zeph20
Espèces	Air/eau	LOx/GH <sub>2</sub>	LOx/GCH <sub>4</sub>	LOx/GCH <sub>4</sub>
Pression chambre [bar]	1	10	26	33
Rapport mélange $R_m$	> 15	2.1	-	-
Rapport des flux de quantité de mouvement $\mathcal{J}$	4	15	2	1
Nombre de Reynolds liquide à l'injection $Re_l$	$\sim 10^4$	$5.5 \times 10^4$	$1.1 \times 10^5$	$1.6 \times 10^5$
Nombre de Reynolds gazeux à l'injection $Re_g$	$\sim 10^4$	$\sim 10^5$	$2.4 \times 10^5$	$1.8 \times 10^5$
Nombre de Weber gazeux $We_g$	$4.9 \times 10^2$	$2.8 \times 10^4$	$2.0 \times 10^4$	$1.90 \times 10^4$
Rapport de masse volumique $\mathcal{R}_\rho$	<b>816</b>	<b>1358</b>	63	52
Longueur d'onde d'instabilité transverse $\lambda_\perp$ [ $\delta_{lip}$ ]	6.7	1.6	0.3	0.2
Longueur cœur liquide $L_c$ [ $D_l$ ]	3.1	1.4	3.1	3.6
Taille de maillage requise	$1 \times 10^8$	$5 \times 10^8$	<b><math>9 \times 10^{10}</math></b>	<b><math>2 \times 10^{11}</math></b>
Nombre d'itérations pour réaliser le calcul	$1 \times 10^6$	$2 \times 10^6$	$1.9 \times 10^6$	$2 \times 10^6$

TABLE 4.1. – Nombres caractéristiques d'injection coaxiale de la littérature et estimation du nombre de mailles nécessaires pour leur réalisation pratique en DNS

Le choix retenu a été de simuler la géométrie PF-ONERA, en réalisant un calcul en similitude par rapport aux nombres sans dimensions. Ainsi, les  $Re_l$ ,  $Re_g$ ,  $We$  et le rapport de quantité de mouvement  $\mathcal{J}$  sont conservés identiques au PF-ONERA mais les propriétés de l'air, sa vitesse d'injection et la tension superficielle de l'eau dans la phase liquide sont modifiées pour réduire le rapport de masse volumique à  $\mathcal{R}_\rho = 82$ . Le régime d'atomisation, qui est le principal intérêt de cette étude, défini par le  $Re_l$  et le  $We_g$  reste ainsi identique au PF-ONERA et sera identifié par la suite par la notation PF-ONERA-Sim.

### 4.3. Description de la simulation DNS

La géométrie du PF-ONERA-Sim est identique à celle du PF-ONERA et est représentée sur la Figure 4.2. Dans la DNS, l'injecteur et le fond de chambre sont modélisés par la méthode de frontières immergées décrite par Marter [2017] comme des parois sans glissement. Les fluides sont injectés sur les bords du domaine par une condition de Dirichlet-Neumann : la vitesse, le VoF, et la valeur de Level-Set sont imposés avec des profils constants, sans injection de turbulence. Les

fluides sont évacués du domaine par une condition de flux assurant la divergence nulle.

L'injecteur coaxial est axisymétrique, dont l'axe de symétrie est représenté par un trait vertical en pointillés, et orienté selon la direction  $X$  dans la suite du manuscrit. La phase liquide est injectée dans un cylindre de diamètre  $l$  sur l'axe de symétrie à une vitesse  $U_l$ . De plus, un chanfrein à l'extrémité de l'injecteur fait diminuer l'épaisseur de la lèvre à une épaisseur de  $\delta_{\text{lip}}$ . Enfin, le gaz est quant à lui injecté à une vitesse  $U_g$  constante dans un anneau d'épaisseur  $h_g$ , autour du cylindre de liquide.

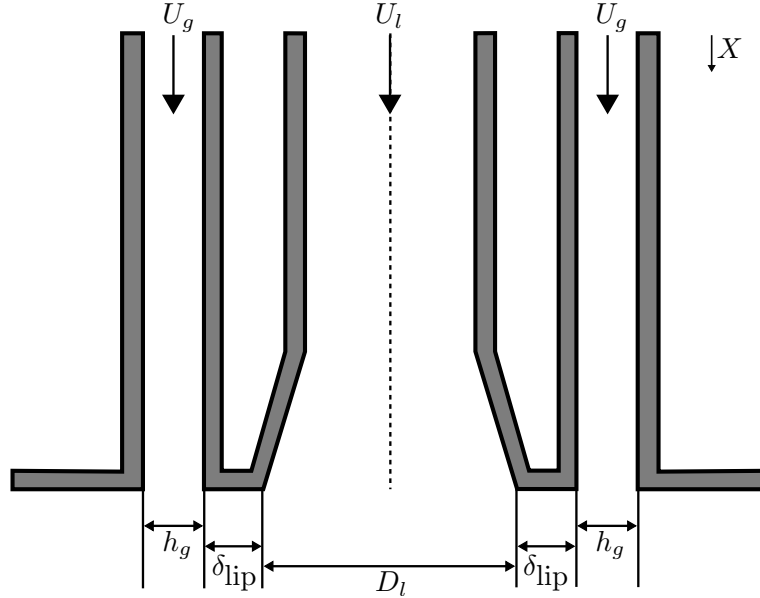


FIGURE 4.2. – Géométrie de l'injecteur de la configuration PF-ONERA

Le domaine de calcul est un parallélépipède de taille  $[L_x \times L_y \times L_z] = [18.6 \times 5.8 \times 5.8] \times l$ . La dimension en  $X$  inclut la longueur de l'injecteur qui est de  $L_{\text{inj}} = 1.79l$ . Les fluides sont injectés sur la face  $X$ -, tous les autres bords du domaine sont considérés comme des conditions aux limites de sortie.

Trois simulations DNS ont été réalisées, en utilisant les trois raffinements de maillage illustrés dans le [Tableau 4.2](#). Le maillage le plus grossier DNS-M3 impose 3 mailles sur la lèvre, tandis que le plus fin en impose  $\simeq 6$ .

	DNS-M1	DNS-M2	DNS-M3
$\Delta_{\text{DNS}}(\delta_{\text{lip}})$	0.17	0.255	0.34

TABLE 4.2. – Tailles de maille DNS

La simulation associée au maillage DNS-M1, réalisée par [Hoarau \*et al.\*](#) [[soumis](#)], constitue le calcul de référence de cette thèse. Avec  $\Delta_{\text{DNS}} = 0.17 \delta_{\text{lip}}$  la grille cartésienne compte 2.8 milliards de points. Ce calcul a été réalisé par J.C. Hoarau pendant son post-doctorat, et a nécessité 45M heures CPU et  $\sim 86000$  cœurs de calcul pendant plusieurs semaines, attribuées dans le cadre du "grand challenge" pour le déploiement du calculateur Topaze (CCRT).

## 4.4. Résultats DNS de référence

Même si la réalisation de la simulation DNS ne fait pas partie du cadre de cette thèse, les champs produits par la simulation ont été largement étudiés pour mesurer des grandeurs comparables aux

LES de cette thèse et inspirer le modèle de sous-maille décrit dans le [Chapitre 6](#). Cette section présente donc les principaux résultats de la simulation de référence DNS-M1 dont les travaux ont été publiés par [Hoarau \*et al.\*](#) [(soumis)]. Un rendu réaliste par *ray-tracing* d'un champ instantané de l'interface liquide/gaz est tracé sur la [Figure 4.3](#).

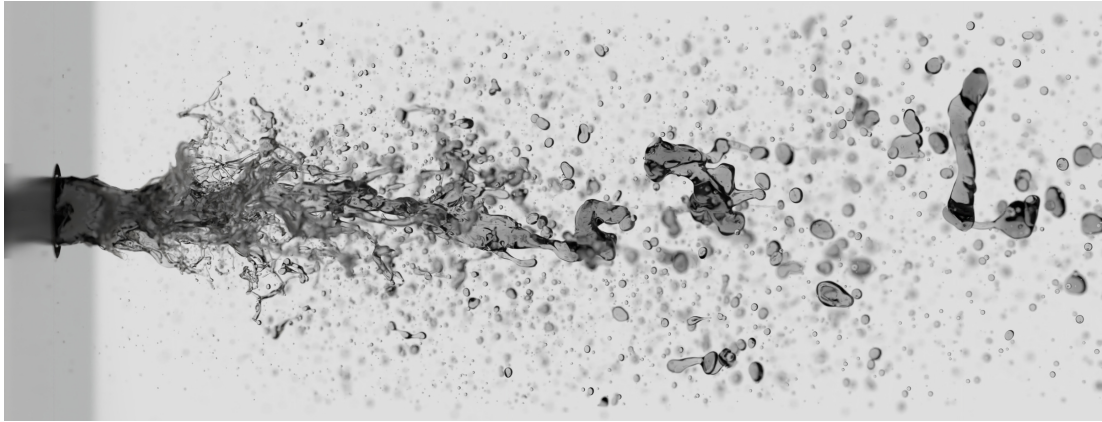


FIGURE 4.3. – Visualisation réaliste de l'interface liquide/gaz issu de la simulation DNS-M1

Cette figure met en évidence l'existence d'un grand nombre de structures liquides de taille et de forme variées qui ne peuvent être caractérisées par des outils de visualisation et d'analyse classiques à cause de leur densité et de leur nature fortement 3D. C'est pourquoi la suite du chapitre s'attarde à présenter un outil de caractérisation du spray et les principaux résultats obtenus sur la configuration sélectionnée.

#### 4.4.1. Outil de caractérisation d'un spray à interface reconstruite

Afin de pouvoir détecter et caractériser l'ensemble des structures liquides de l'écoulement, l'outil développé par [Averseng \[2022\]](#) est utilisé. La grande valeur ajoutée de cet algorithme est de donner accès à des informations discrètes sur les structures liquides de l'écoulement à partir de champs continus. Cette section a pour objectif de décrire le fonctionnement de cet outil et des grandeurs qu'il permet d'extraire pour donner accès à un grand nombre de statistiques sur les structures liquides atomisées.

##### 4.4.1.1. Introduction de l'outil

Développés à l'origine pour identifier les structures liquides et les transférer à un solveur de phase dispersée Lagrangien, les algorithmes d'abord CCL (*Connected Component Labeling*) d'[Herbert \*et al.\*](#) [2008] puis d'ICL (*Informed Component Labeling*) par [Hendrickson \*et al.\*](#) [2020] distinguent les structures liquides isolées par identification des mailles connectées contenant de la phase liquide. [Averseng \[2022\]](#) propose d'utiliser la méthode PLIC pour une précision accrue dans la séparation des structures liquides proches. Ainsi, la détection de liquide est compatible avec les méthodes géométriques VoF, Level-Set et de Front-Tracking décrites dans la [Section 3.2.1.2](#). L'utilisation de cet algorithme avec une approche algébrique de l'interface sera détaillée dans la [Section 5.2](#).

L'algorithme est entièrement parallèle avec une structure de données dérivée de DyJeAT. Il peut être utilisé soit compilé à l'intérieur de DyJeAT, utilisant ainsi directement les tableaux de VoF et de Level-Set en mémoire, soit a posteriori par relecture des champs archivés. Son utilisation externe au code DyJeAT, nommée AlgoDetect, utilise :

- soit les champs VoF et Level-Set pour une précision maximale. Il est important de noter que les grandeurs quantifiées sur les structures liquides peuvent varier de manière mineure en comparaison à l'algorithme embarqué causé par l'archivage des champs DyJeAT, qui sont sauvegardés en simple précision ;

- soit le champ de Level-Set uniquement avec une reconstruction du champ de VoF, pour une faible perte de précision sur les grandeurs quantifiées (Paragraphe 4.4.1.3)
- soit le champ de VoF uniquement avec une reconstruction du champ de Level-Set, pour une faible perte de précision sur les grandeurs quantifiées (Paragraphe 4.4.1.3). Cette dernière fonctionnalité sera utilisée pour une application sur interface diffuse décrite dans la Section 5.2.

L'intégration de l'algorithme dans le code DyJeaT et son utilisation non-embarquée sont illustrées sur la Figure 4.4.

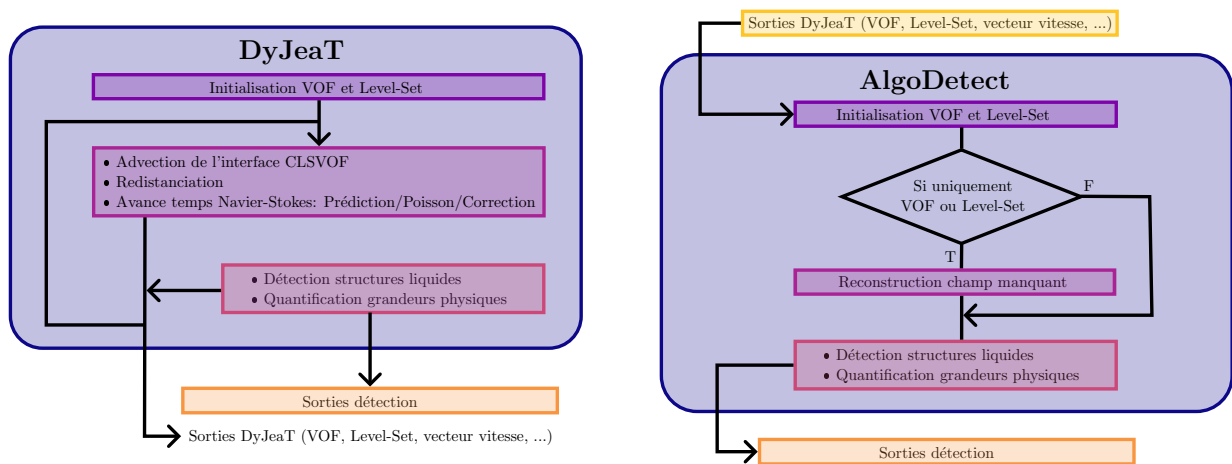


FIGURE 4.4. – Inclusion de l'algorithme de détection dans DyJeaT et principe de fonctionnement en externe (AlgoDetect)

#### 4.4.1.2. Fonctionnement de l'algorithme

Le fonctionnement de l'algorithme est identique pour sa version embarquée et externe, et a été expliqué en détail par Averseng [2022]. Les étapes fondamentales de l'algorithme sont les suivantes :

1. Attribution d'un tag unique pour chacune des cellules ayant  $\text{VoF} > \text{VoF}_{\text{lim}} = 10^{-8}$
2. Positionnement du VoF au sein de la cellule. L'interface est reconstruite par la méthode PLIC (présentée dans le Paragraphe 3.2.1.2), permettant de positionner le liquide au sein de la maille. Ainsi, les sommets immergés de la maille sont identifiés.
3. Les cellules contenant du liquide étant identifiées ainsi que les sommets immergés d'une maille, les tags peuvent être propagés au sein d'une même structure liquide. Les cellules adjacentes d'une même structure liquide acquièrent le tag de valeur la plus faible présente au sein de la structure liquide. Ce processus est illustré sur la Figure 4.5 où 3 structures liquides sont identifiées.
4. Diffusion des tags aux processus parallèles voisins par les cellules fantômes. Utilisant le même principe qu'à l'étape précédente, le tag de plus faible valeur est conservé.
5. Évaluation des caractéristiques des structures liquides en utilisant les cellules de même tag. Les grandeurs évaluées sont présentées dans la section suivante.

#### 4.4.1.3. Quantification des structures liquides

##### Grandeurs évaluées

Une fois toutes les structures liquides détectées, et identifiées par un tag unique, les grandeurs suivantes sont calculées et archivées :

- tag : Identifiant unique par archive ;

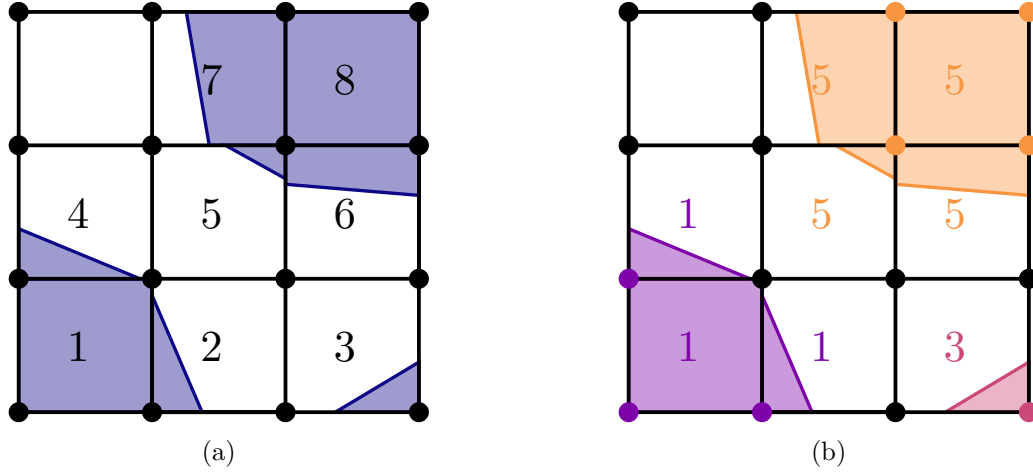


FIGURE 4.5. – Exemple de structures liquides détectées et balisées (a) avant et (b) après propagation des tags, indiqué dans chaque cellule

—  $N_{\text{cells}}$  : Nombres de mailles de la structure liquide :

$$N_{\text{cells}}(i) = \sum_{\text{tag}=i} 1 ; \quad (4.2)$$

—  $S$  [ $m^2$ ] : Aire interfaciale de la structure liquide. Après avoir déterminé les coefficients de l'équation du plan de l'interface au sein de la maille avec la méthode PLIC, l'aire de l'interface est calculée avec la librairie VOFTools de López et Hernández [2008] pour toutes les cellules respectant  $\text{VoF}_{\text{lim}} < \text{VoF} < 1 - \text{VoF}_{\text{lim}}$  :

$$S(i) = \sum_{\text{tag}=i} S_{\text{cellules interfaces}}(i) ; \quad (4.3)$$

—  $V$  [ $m^3$ ] : Volume de liquide de la structure. Le volume est calculé par somme du VoF contenu dans chaque cellule de la structure liquide multiplié par le volume de chaque maille. Le maillage étant structuré cartésien, le volume est identique pour toutes les mailles ce qui simplifie la procédure :

$$V(i) = \Delta_{\text{DNS}}^3 \times \sum_{\text{tag}=i} \text{VoF}(i) ; \quad (4.4)$$

—  $\beta$  : Sphéricité de la structure liquide déterminée par le rapport entre l'aire d'interface de la sphère équivalente de volume  $V$  donné par l'Equation 4.5, et sa surface réelle  $S$  :

$$S_{\text{sphère}}(i) = \pi^{1/3} \times (12V(i))^{2/3} , \quad (4.5)$$

$$\beta = \frac{S_{\text{sphère}}(i)}{S(i)} ; \quad (4.6)$$

—  $L_{(x,y,z)}$  : Longueur de la structure liquide dans chacune des 3 directions X, Y et Z :

$$L_{(x,y,z)}(i) = \max_{\text{tag}=i} \begin{pmatrix} x(i) \\ y(i) \\ z(i) \end{pmatrix} - \min_{\text{tag}=i} \begin{pmatrix} x(i) \\ y(i) \\ z(i) \end{pmatrix} ; \quad (4.7)$$

—  $(x, y, z)_{\text{cg}}$  : Coordonnées du centre de gravité de la structure liquide :

$$\begin{pmatrix} x_{\text{cg}}(i) \\ y_{\text{cg}}(i) \\ z_{\text{cg}}(i) \end{pmatrix} = \frac{\sum_{\text{tag}=i} \text{VoF}(i) \times \begin{pmatrix} x(i) \\ y(i) \\ z(i) \end{pmatrix}}{\sum_{\text{tag}=i} \text{VoF}(i)} ; \quad (4.8)$$

—  $u_{(x,y,z),\text{cg}}$  : Vitesse de la structure liquide évaluée à son centre de gravité :

$$\begin{pmatrix} u_{x,\text{cg}}(i) \\ u_{y,\text{cg}}(i) \\ u_{z,\text{cg}}(i) \end{pmatrix} = \frac{\sum_{\text{tag}=i} \text{VoF}(i) \times \begin{pmatrix} u_x(i) \\ u_y(i) \\ u_z(i) \end{pmatrix}}{\sum_{\text{tag}=i} \text{VoF}(i)} , \quad (4.9)$$

avec  $u_x$ ,  $u_y$  et  $u_z$  les composantes de la vitesse locale dans les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$  respectivement.

### Ligaments détachés et gouttes

Les statistiques fournies permettent d'analyser le spray dans sa globalité. En revanche, les structures liquides peuvent avoir des topologies différentes en fonction de la localisation ou du moment de l'atomisation : en particulier, à proximité du cœur liquide les structures liquides assument la forme étirée du ligament, tandis que les gouttes apparaissent suite à la rupture de ceux-ci. Il est donc crucial de pouvoir distinguer la nature de la structure détectée. Pour distinguer une goutte sphérique d'un ligament détaché non sphérique, il faut positionner une limite nécessairement arbitraire car la distribution de forme des structures liquides est continue. Le premier critère évident venant à l'esprit porte sur la sphéricité  $\beta$  définie dans le [Paragraphe 4.4.1.3](#). Le deuxième,  $\gamma$ , est le rapport entre la longueur maximale et minimale d'une structure liquide, égal à 1 pour une sphère et  $> 1$  sinon :

$$\gamma = \frac{\max(L_x, L_y, L_z)}{\min(L_x, L_y, L_z)} . \quad (4.10)$$

Afin d'étudier la pertinence de ces deux critères, un cas théorique est défini consistant en un cylindre de rayon  $r_{\text{cyl}}$  avec deux demi sphères aux extrémités. Pour faire varier la forme de la structure on fait varier la longueur du cylindre  $L_{\text{cyl}}$  de  $0 r_{\text{cyl}}$  (sphère), à  $20 r_{\text{cyl}}$ . La [Figure 4.6](#) trace la valeur du critère de sphéricité  $\beta$  ainsi que du critère  $\gamma$ . Une représentation de la structure est aussi tracée afin de visualiser la forme réelle de la structure liquide théorique. Ce cas théorique révèle la faible sensibilité du critère  $\beta$  à l'élongation de la structure, donnant une sphéricité de 0.7 pour  $L_{\text{cyl}} = 10 r_{\text{cyl}}$  contre 0.17 avec le critère  $\gamma$ . C'est donc le critère  $\gamma$  qui sera retenu par la suite afin de différencier les gouttes des structures allongées.

Cependant, le critère  $\gamma$  utilise les longueurs  $L_x$ ,  $L_y$  et  $L_z$  qui sont définies selon les directions X, Y et Z. Une structure liquide étirée dans une direction différente (par exemple  $\vec{x} + \vec{y}$ ) peut ainsi avoir une boîte englobante cubique sans pour autant être sphérique. Pour prendre en compte ce cas de figure, un second critère  $\xi$  basé sur le remplissage de la boîte englobante donné par :

$$\xi = \frac{V}{\frac{\pi}{6} L_x L_y L_z} , \quad (4.11)$$

est utilisé. Le critère vaut 1 pour une structure liquide parfaitement sphérique et est strictement inférieur à 1 sinon. La [Figure 4.7](#) montre la classification de structures par les critères  $\gamma$  et  $\xi$ .

Par la suite, une structure liquide sera identifiée comme ligament détaché lorsque au moins l'un des deux critères du [Tableau 4.3](#) est respecté.

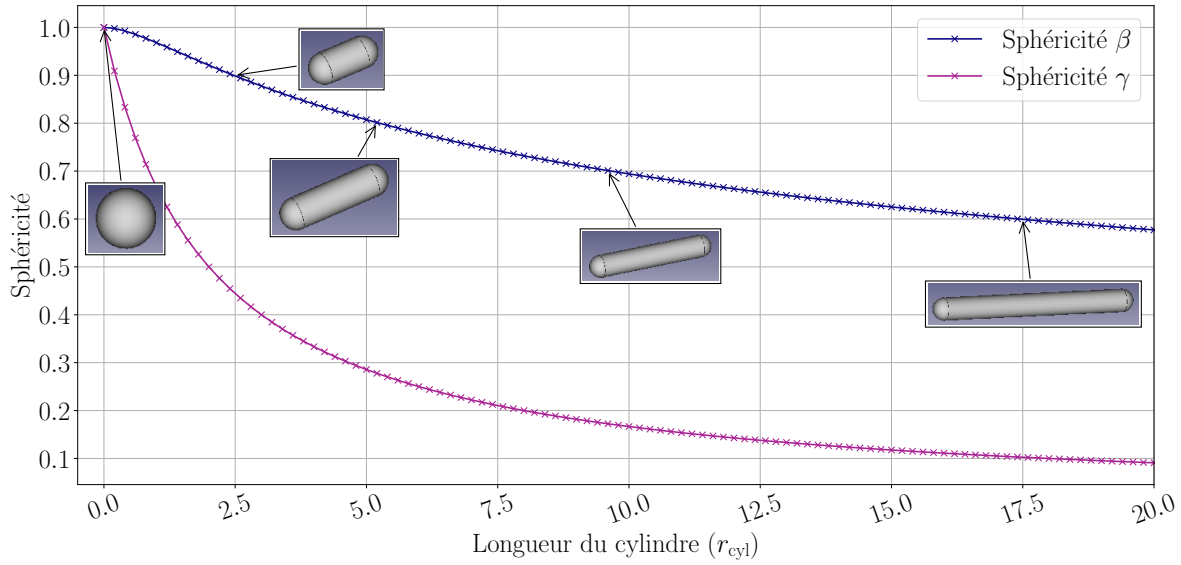


FIGURE 4.6. – Critères de sphéricité  $\beta$  et  $\gamma$  fonction de la longueur du cylindre  $L_{\text{cyl}}$  de la structure liquide théorique

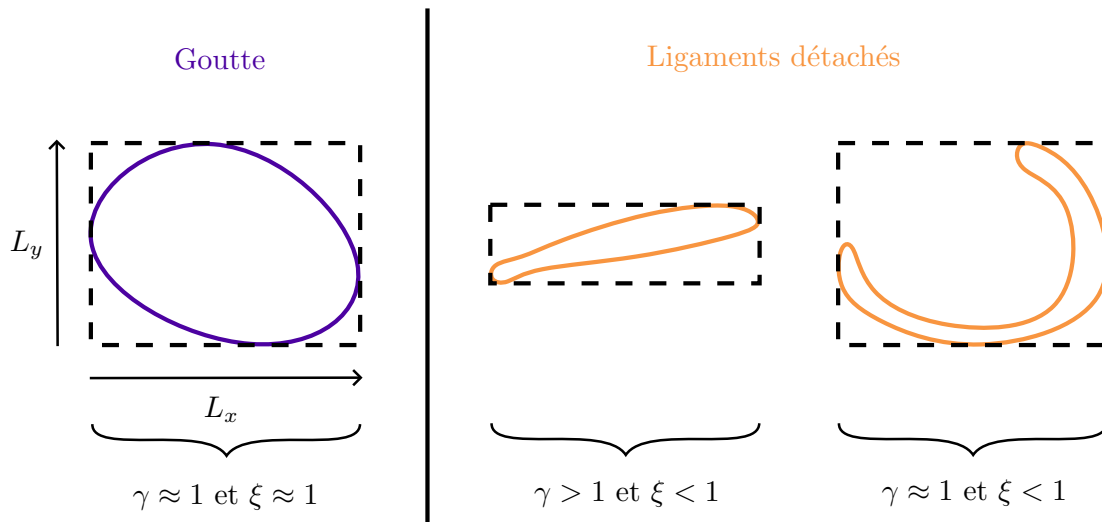


FIGURE 4.7. – Classification de structures liquides en fonction des critères  $\gamma$  et  $\xi$

$\gamma$	$\xi$
$> 1.6$	$< 0.5$

TABLE 4.3. – Critères de définition d'un ligament détaché

#### 4.4.2. Caractérisation d'un spray coaxial DNS

La simulation DNS est réalisée sur un temps physique total de  $t = 0.073$  s. Le transitoire a été estimé comme terminé au temps de 0.036 s, laissant un temps  $t_{\text{ac}} = 0.037$  s d'écoulement développé pour permettre d'enregistrer des statistiques. Pendant toute cette période, environ 500 instants ont été archivés permettant la quantification de chaque structure liquide de l'écoulement avec l'outil décrit dans la [Section 4.4.1](#), ainsi que des moyennes temporelles des champs de VoF, Level-Set, vitesse et de densité d'aire interfaciale. L'ensemble des données fournies par la DNS et présenté dans cette section est utilisé dans les chapitres suivants du manuscrit comme référence.



#### 4.4.2.1. Longueur de cœur liquide

Le cœur liquide peut être identifié de plusieurs manières sur les données issues de la détection par AlgoDetect. Il est systématiquement l'objet comportant le plus de cellules, celui ayant le volume maximal, la surface maximale et la longueur dans la direction de l'écoulement  $X$  maximale. Une fois identifiée, la longueur de cœur liquide est calculée en soustrayant la longueur de l'injecteur à la distance entre les positions extrémales du cœur liquide suivant la direction  $X$  :

$$L_{\text{cœur}} = L_x - L_{\text{inj}} . \quad (4.12)$$

La Figure 4.8 trace l'évolution temporelle de la longueur de cœur liquide tout au long de la simulation avec une barre verticale indiquant l'estimation de la fin du régime transitoire. Le régime transitoire est facilement identifiable par la croissance presque ininterrompue du cœur liquide jusqu'à sa première rupture. Ensuite, les ruptures suivantes sont assez aléatoires, diminuant la longueur du cœur de  $1 D_1$  à plus de  $4 D_1$  suivant les événements. On remarque que l'on attend quelques ruptures supplémentaires du cœur liquide pour commencer les statistiques afin d'avoir la certitude que le régime transitoire est bien évacué.

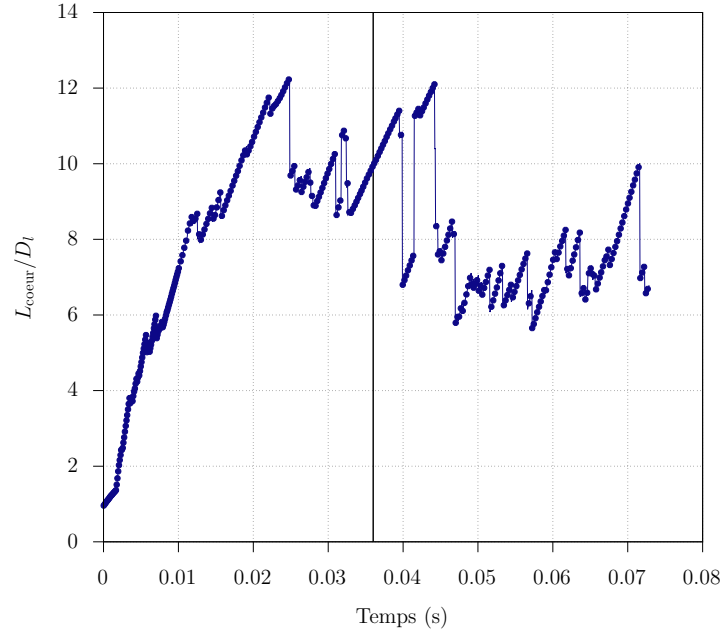


FIGURE 4.8. – Évolution temporelle de la longueur de cœur liquide et position estimée de la fin du transitoire

La longueur de cœur liquide est non seulement un marqueur du régime transitoire pour les jets atomisants par l'identification des premières ruptures du cœur liquide, mais aussi un indicateur de l'atomisation structurelle de Grout *et al.* [2007] définie dans la Section 2.1.3. Elle constitue ainsi une grandeur de première ordre pour la comparaison de simulations diphasiques atomisantes.

#### 4.4.2.2. Analyse du spray

L'ensemble des structures liquides issues de l'atomisation du cœur liquide sont aussi détectées et sont analysées dans cette section. La Figure 4.9 trace l'évolution temporelle du nombre de gouttes total dans le domaine de calcul respectant  $\sqrt[3]{L_x L_y L_z} \in [0, 5\Delta_{\text{DNS}}]$  avec une barre verticale marquant la fin de l'évacuation du transitoire, identique à celle de la Figure 4.8. En effet, cette quantité permet également de repérer la fin du régime transitoire lorsque l'écoulement atteint un équilibre entre les gouttes sortant des limites du domaine et les gouttes créées par atomisation.

Une fois en régime établi, la distribution en taille de l'ensemble des structures liquides de l'écoulement est analysée par étude des PDFs (*Probability Density Functions*). Cette étude permet



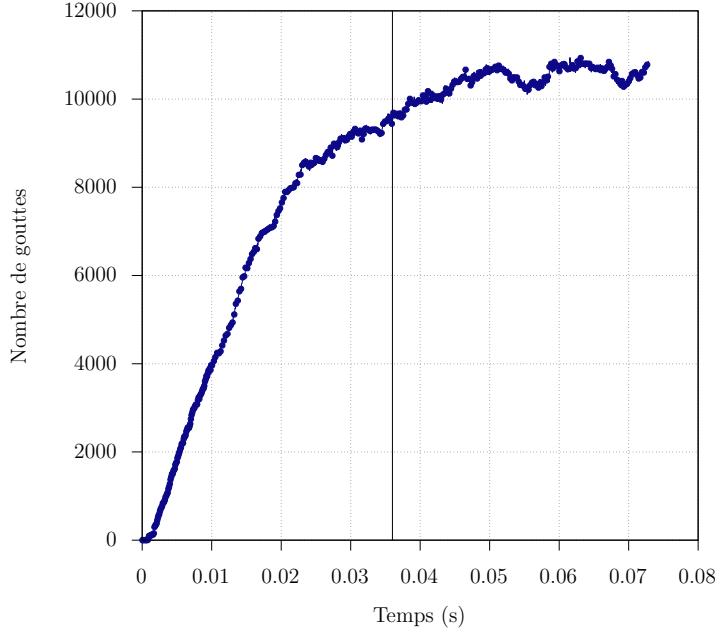


FIGURE 4.9. – Évolution temporelle du nombre de gouttes telles que  $\sqrt[3]{L_x L_y L_z} \in [0, 5\Delta_{\text{DNS}}]$

aussi d'identifier quelles échelles diphasiques sont résolues avec un maillage donné par comparaison entre les simulations DNS-M1, DNS-M2 et DNS-M3. La taille des structures liquides est estimée à partir de leur volume sans considération de forme par :

$$d_{30} = V^{1/3} . \quad (4.13)$$

L'Equation 4.13 diffère de la formulation classique pour une sphère ( $d_{30} = (3V/\pi)^{1/3}$ ) car elle ne prend aucune hypothèse sur la forme des structures liquides caractérisées. Cette formulation est nécessaire de par la grande variété de formes des structures atomisées qui peuvent être observées sur la Figure 4.3. Ensuite, la densité de probabilité globale de la taille  $d_{30}$  est calculée en cumulant les PDFs continues de chaque goutte  $f_{h_{\text{liss}}}$  :

$$f_{h_{\text{liss}}}(d_{30}) = \frac{1}{Nh_{\text{liss}}} \sum_{i=1}^N K_{\text{PDF}} \left( \frac{d_{30} - d_i}{h_{\text{liss}}} \right) , \quad (4.14)$$

où  $N$  est le nombre total de gouttes,  $h_{\text{liss}}$  la fenêtre régissant le lissage de l'estimation,  $K_{\text{PDF}}$  le noyau et  $d_i$  un échantillon de  $d_{30}$ . Ici, le noyau est une fonction gaussienne donné par :

$$K_{\text{PDF}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} , \quad (4.15)$$

avec une espérance nulle et une variance unitaire. Cette estimation permet de limiter l'influence de la taille de l'intervalle défini dans un histogramme. Le spectre des tailles est discrétisé avec un pas de  $1/18 \Delta_{\text{DNS-M1}}$ , chacune des positions correspondant à une taille  $i$  de l'Equation 4.14. Pour toutes ces positions, une gaussienne est associée à chaque structure liquide de l'écoulement de taille  $d_{30}$ . Toutes les contributions sont sommées pour aboutir à l'Equation 4.14.

Le choix du paramètre  $h_{\text{liss}}$ , qui caractérise l'étalement de la gaussienne, est important. Une valeur trop faible revient à imposer un dirac pour chaque  $d_{30}$  et donc à tracer un histogramme dont le pas est celui de la discrétisation du spectre. Au contraire, une valeur trop élevée lisse complètement les irrégularités de la PDF. Ainsi, un compromis est fait pour convenir à toutes les simulations,  $h_{\text{liss}} = 1/34\Delta_{\text{DNS-M2}} \approx 1/23\Delta_{\text{DNS-M1}} \approx 1/45\Delta_{\text{DNS-M3}}$ , valeur très largement inférieure à la taille de maille de la résolution la plus fine. La Figure 4.10 trace les PDFs ainsi estimées de l'ensemble des structures liquides archivées au cours des simulations DNS-M1, DNS-

M2 et DNS-M3. Les trois PDFs ont un profil log-normale classique (Panão [2023]) avec des pics respectifs à  $0.34 \delta_{\text{lip}}$ ,  $0.5 \delta_{\text{lip}}$  et  $0.65 \delta_{\text{lip}}$ . En s’aidant du Tableau 4.2, on peut noter que le pic de la PDF est systématiquement à  $d_{30} = 2\Delta_{\text{DNS}}$ .

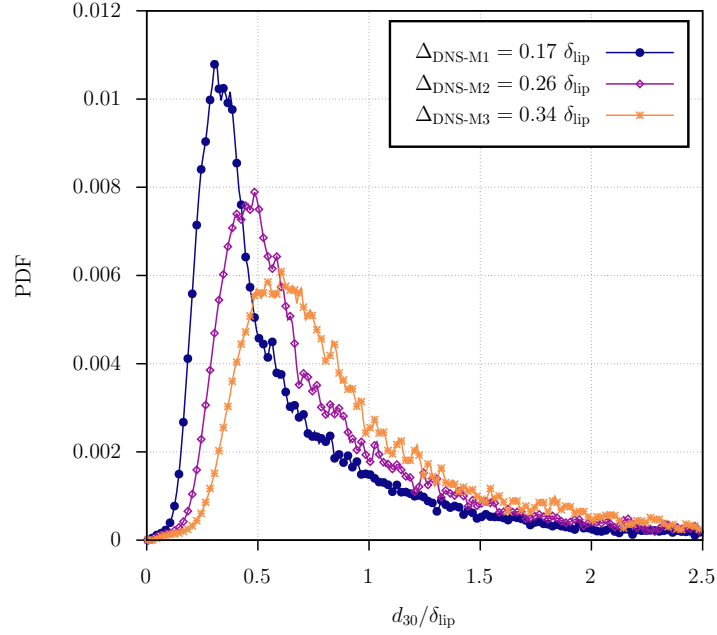


FIGURE 4.10. – Densité de probabilité estimée par noyau gaussien des maillages DNS-M1, DNS-M2 et DNS-3

Cependant, les valeurs maximales entre les PDFs des simulations DNS-M1, DNS-M2 et DNS-M3 sont très largement différentes. En effet, le nombre de structures liquides  $n$ , dont les moyennes sont données dans le Tableau 4.4, varie grandement entre les configurations.

	DNS-M1	DNS-M2	DNS-M3
$n$	$\sim 15000$	$\sim 9000$	$\sim 6500$

TABLE 4.4. – Nombre moyen de structures liquides dans le domaine de calcul

En considérant que la DNS-M2 et la DNS-M3 simulent toutes les structures liquides jusqu’à une certaine échelle dépendant du maillage, la Figure 4.11 compare les PDFs avec une mise à l’échelle à travers le rapport entre le nombre de gouttes de la simulation considérée  $n$  sur le nombre de gouttes de la simulation DNS-M1 noté  $n_{\text{DNS-M1}}$ . Ainsi, avec la mise à l’échelle proposée, on constate que les PDFs des simulations DNS-M2 et DNS-M3 se superposent à la PDF de la simulation DNS-M1 jusqu’à leur valeur maximale. Ceci indique que l’écoulement des simulations DNS-M2 et DNS-M3 produisent une proportion identique de structures liquides jusqu’à la taille correspondant au pic de la PDF. Ainsi, on en déduit une échelle de résolution diphasique au pic de chacune des simulations qui correspond pour chacune des simulation à 2 fois leur taille de maille  $\Delta_{\text{DNS}}$ . Cette observation est cohérente avec le critère de Nyquist donnant 3 points, soit 2 mailles pour résoudre une structure liquide.

Une autre manière pour comparer les PDFs des simulations DNS est de les filtrer par leur taille jusqu’à une échelle de coupure afin de vérifier la convergence en maillage des grandes structures liquides de l’écoulement. La comparaison des PDFs filtrées à  $\Delta_{\text{DNS-M3}}$  est tracée sur la Figure 4.12. Les trois PDFs se superposent complètement sur tout le spectre, confirmant pour le maillage DNS-M3 l’hypothèse sur la distribution en taille est indépendante du maillage jusqu’à une échelle de coupure  $\geq 2 \Delta_{\text{DNS-M3}}$ .

Bien que la distribution en taille de structures liquides soit indépendante du maillage jusqu’à

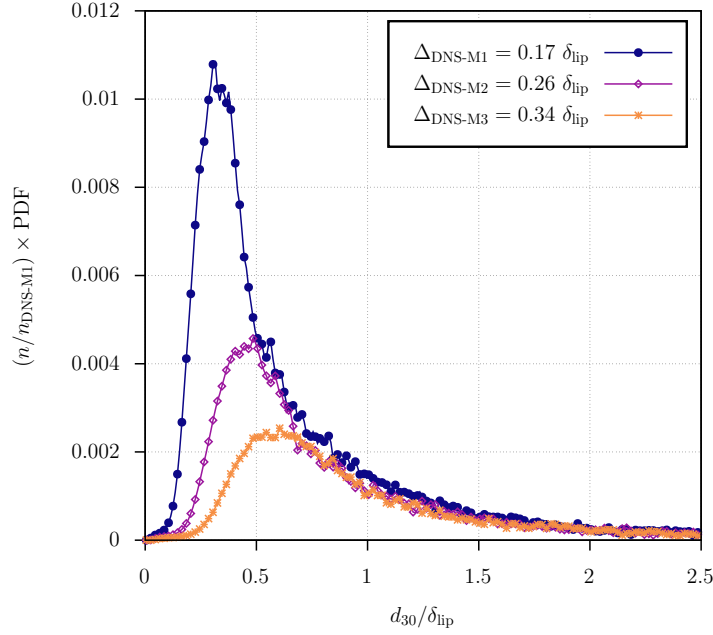


FIGURE 4.11. – Densité de probabilité du maillage DNS-M1 et des maillages DNS-M2, DNS-M3 mis à l'échelle

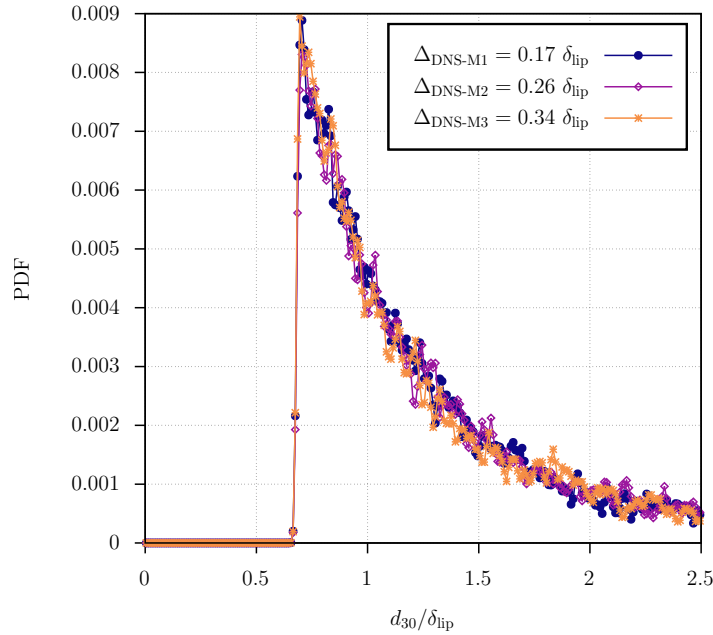


FIGURE 4.12. – Densité de probabilité des maillages DNS-M1, DNS-M2, DNS-M3 filtrées à  $2\Delta_{DNS-M3}$

$2\Delta_{DNS}$ , on peut se demander si le spray et donc le nombre de gouttes est aussi identique dans le domaine entre les maillages. Le [Tableau 4.5](#) donne le nombre moyen de structures liquides dans le domaine de calcul  $N_{\text{filt}}$  de chaque simulations jusqu'à la plus petite échelle de coupure  $2\Delta_{DNS-M3}$ . Cette grandeur étant aussi globalement indépendante du maillage, ceci indique que le spray est relativement indépendant en distribution et en nombre sur le maillage jusqu'à l'échelle de coupure  $2\Delta_{DNS}$ .

	DNS-M1	DNS-M2	DNS-M3
$n_{\text{filt}}$	$\sim 940$	$\sim 830$	$\sim 860$

TABLE 4.5. – Nombre moyen de structures liquides dans le domaine de calcul filtrés jusqu'à  $d_{30} = \Delta_{\text{DNS-M3}}$

#### 4.4.2.3. Densité d'aire interfaciale

La densité d'aire interfaciale  $\Sigma$ , évoquée dans la [Section 3.2.4.1](#), est une grandeur d'intérêt dans cette thèse pour modéliser l'atomisation en fonction des conditions locales de l'écoulement. La densité d'aire interfaciale a été mesurée sur la DNS à partir de considérations géométriques :

$$\Sigma = \frac{S_{\text{cellules interface}}}{\Delta_{\text{DNS}}^3}, \quad (4.16)$$

avec  $S_{\text{cellules interface}}$ , la surface de l'interface reconstruite calculée par VOFTools de manière identique à l'[Equation 4.3](#). En prenant l'hypothèse qu'en moyenne l'écoulement est axisymétrique, une moyenne azimutale du champ moyenné temporellement de densité d'aire interfaciale a été réalisée. La [Figure 4.13](#) trace le champ de densité d'aire interfaciale moyenné temporellement et azimutalement, et illustre des abscisses axiales clés du phénomène d'atomisation :  $X = x/D_l = \{0.5, 1, 2, 4, 8, 16\}$ , qui serviront de référence dans le [Chapitre 6](#). Pour  $0 < X < 1$ , la densité d'aire interfaciale maximale est concentrée dans une zone autour de la lèvre. Ces valeurs élevées sont localisées dans la zone de développement des instabilités interfaciales qui concentre les valeurs instantanées de  $\Sigma$ . De plus, à ces positions, on distingue la présence du cœur liquide sur l'axe pour  $r < 0.5D_l$  et une zone de recirculation avec quelques trajectoires dessinées par des structures liquides piégées pour  $r > 0.5D_l$ . En aval, le jet s'ouvre avec des valeurs de densité d'aire interfaciale de plus en plus faibles.

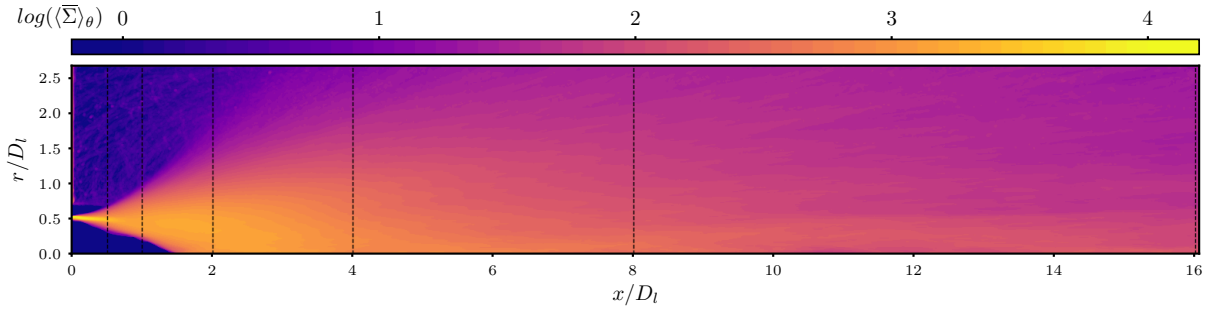


FIGURE 4.13. – Champ moyen temporel et azimutal de densité d'aire interfaciale

Bien que la [Figure 4.13](#) donne un aperçu des valeurs de  $\Sigma$ , elle n'est pas suffisante pour quantifier la production d'aire interfaciale liée au phénomène d'atomisation. L'intégrale de densité d'aire interfaciale du champ de la [Figure 4.13](#) pour chaque plan transverse s'exprime comme suit :

$$\Sigma_f(x_i) = \Delta_{\text{DNS}}^2 \sum_{y_i, z_i} \Sigma(x_i, y_i, z_i). \quad (4.17)$$

Il est tracé sur la [Figure 4.14](#). De plus, le nombre de gouttes et de ligaments détachés définis dans le [Paragraphe 4.4.1.3](#) par les critères  $\gamma$  et  $\xi$  sont aussi tracés afin d'évaluer la corrélation entre la présence de ces deux types de structures et la densité d'aire interfaciale.

Malgré la valeur pic de  $\Sigma$ , la tranche  $0 < X < 1$  contient en réalité une très faible quantité d'interface très localisée correspondant au cœur liquide. La quantité d'interface croît jusqu'à une valeur maximale en  $X = 2.2$ , puis décroît progressivement en aval. Le nombre de gouttes et le nombre de ligaments détachés suivent la même tendance mais à des positions différentes. En

effet, le maximum du nombre de ligaments détachés est situé à une position identique de celui du maximum de densité d'aire interfaciale en  $X = 2.2$ , tandis que le nombre maximal de gouttes est situé plus en aval à  $X = 5$ . Ainsi, de manière contre intuitive au premier abord, la quantité d'interface n'est pas seulement corrélée à la présence en nombre de gouttes sphériques mais aussi à des ligaments détachés. Plusieurs raisons peuvent expliquer ce phénomène :

- Les ligaments détachés correspondent à des structures en cours d'atomisation qui présentent un ratio élevé surface d'interface sur volume, et donc une densité d'aire interfaciale élevée. Ces structures liquides se brisent en des structures de plus petite taille qui tendent à devenir sphériques en aval.
- La tension superficielle tend à rendre les structures sphériques. Or, la forme qui minimise l'aire interfaciale est la sphère. En effet, la densité d'aire interfaciale présente une décroissance en s'éloignant du cœur liquide.

Il faut cependant noter que l'algorithme de détection AlgoDetect ne traite que les structures liquides détachées du cœur liquide, alors qu'une part importante d'aire interfaciale est contenue dans des structures liquides, encore attachées au cœur liquide. Ce dernier n'étant considéré comme une seule entité par AlgoDetect, il localise toute la densité d'aire interfaciale en un seul point correspondant à son centre de masse.

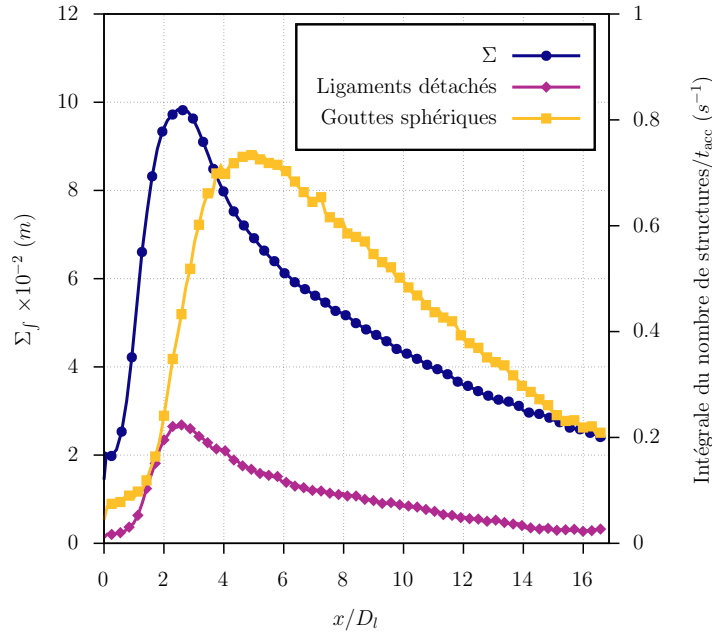


FIGURE 4.14. – Intégrale de la densité d'aire interfaciale selon l'axe  $X$ , et intégrales du nombre de ligaments détachés et de gouttes sphériques

En combinant AlgoDetect pour la distinction entre le cœur liquide, les ligaments détachés et les gouttes sphériques à l'estimation de l'aire d'interface, une mesure de l'intégrale de surface d'interface sur l'axe  $X$  est tracée sur la Figure 4.15 (Hoarau *et al.* [(soumis)]). Les contributions des ligaments encore attachés et de tous les plissements du cœur à la densité d'aire interfaciale sont ainsi mis en évidence. De plus, on note que de manière identique au nombre de ligaments détachés, la position du maximum d'aire interfaciale est corrélée à la position du maximum de densité d'aire interfaciale tracée sur la Figure 4.14.

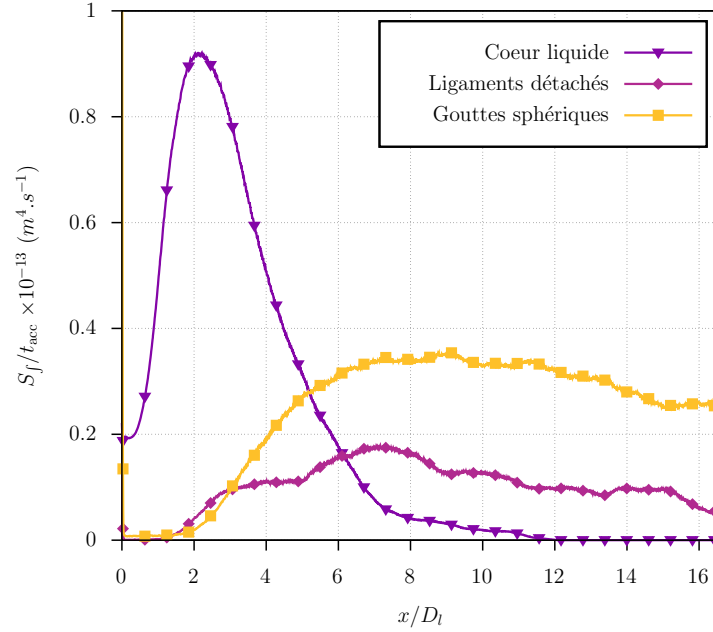


FIGURE 4.15. – Intégrale de l’aire interfaciale selon l’axe  $X$  pour le cœur liquide, les ligaments détachés et les gouttes sphériques

## Bilan

La démarche d’étude, consistant à utiliser une simulation DNS comme référence de cette thèse a été présentée. Les résultats des simulations de référence permettront de valider la stratégie de simulation LES diphasique CEDRE par comparaison des grandeurs caractéristiques du spray résolu et sous maille LES à la DNS. Les différentes configurations possibles ont été présentées, et le choix d’une similitude du cas PF-ONERA on été fait, justifié par des contraintes de coût de calcul liées à réalisation de la DNS. Ensuite, le fonctionnement de l’algorithme développé par Averseng [2022] AlgoDetect a été décrit ainsi que les grandeurs qu’il permet de produire à partir des champs résultats d’une simulation avec le code DyJeAT. L’outil est utilisé pour suivre l’évolution du cœur liquide et des structures liquides permettant notamment d’évaluer la durée du régime transitoire des simulations DNS réalisées par J.C. Hoarau dans le cadre de son post-doctorat. Le spray de la configuration a été caractérisé par étude de PDFs et un critère de résolution des structures diphasiques en fonction du maillage a été identifié. La même méthode sera appliquée dans le Chapitre 5 sur des simulations LES. Enfin, les champs de densité d’aire interfaciale mesurés à partir des résultats de la DNS ont été introduits, il serviront de données de validation pour le modèle de densité d’aire interfaciale dans le Chapitre 6.



# Simulation aux grandes échelles de l'atomisation

L'objectif de ce chapitre est d'évaluer l'approche diphasique aux grandes échelles par interface diffuse pour la simulation de l'atomisation d'un jet issu d'un injecteur coaxial. En particulier, un critère permettant de quantifier la capacité de l'approche à résoudre les grandes structures liquides sera identifié.

Dans un premier temps les paramètres de la simulation LES sont présentés. Le choix du domaine de calcul, du maillage, des conditions aux limites et des modèles numériques permettent d'obtenir un régime d'atomisation identique à celui de la DNS de référence et rendent ainsi possible une analyse comparative des grandes échelles de l'écoulement diphasique.

Dans un second temps, deux méthodes de caractérisation de structures liquides diffuses seront comparées. La première consiste à se ramener à une interface infiniment mince tandis que la deuxième considère l'ensemble des cellules de l'interface diffuse jusqu'aux fractions volumiques les plus faibles. Deux échelles de coupure diphasiques sont ensuite identifiées par comparaison à la DNS. Ces échelles définissent quelles structures liquides sont résolues avec la modélisation détaillée dans [Section 3.2.2.3](#) sur un critère volumique et surfacique. Elles permettent, entre autres, de positionner la séparation d'échelles entre la phase séparée et dispersée lors de simulations LES du spray complet. De plus, l'échelle de coupure surfacique est aussi utilisée comme paramètre du modèle de densité d'aire interfaciale dans le chapitre suivant.

## Sommaire

<b>5.1. Simulation par interface diffuse</b>	<b>86</b>
5.1.1. Domaine de calcul et discrétisation spatiale	86
5.1.2. Modèles numériques	88
5.1.3. Stratégie de simulation	89
5.1.4. Validation des conditions d'atomisation	90
<b>5.2. Identification d'échelles de coupure diphasique</b>	<b>92</b>
5.2.1. Interprétation reconstruite	92
5.2.1.1. Cas de convection d'une goutte	92
5.2.1.2. Application au cas coaxial	95
5.2.2. Interprétation diffuse	97
5.2.2.1. Principe de mesure	98
5.2.2.2. Échelle de coupure en volume	100
5.2.2.3. Résolution en surface	102
5.2.2.4. Diffusion spatiale	103
5.2.3. Bilan sur les approches diffuse et reconstruite	105



## 5.1. Simulation par interface diffuse

Le chapitre précédent a déjà introduit le choix du dispositif expérimental ainsi que la simulation DNS de référence avec ses principaux résultats. Cette section se concentre sur la description de la simulation LES CEDRE qui servira à identifier les échelles de coupure diphasiques dans la [Section 5.2](#), caractérisant une taille limite de résolution diphasique par analogie à l'échelle de coupure LES pour la turbulence. Afin de garantir une comparaison précise avec la DNS de référence, différentes contraintes sont imposées sur le choix du domaine de calcul et du maillage de la simulation LES :

- Le domaine de calcul doit être identique à celui de la DNS. La longueur de l'injecteur, la longueur et la largeur de la chambre sont donc imposées ;
- Le régime d'atomisation doit être identique à celui de la DNS. Les conditions aux limites sont choisies au plus proche de ce qui a été imposé dans la DNS, et le maillage de l'injecteur doit permettre de retrouver les mêmes profils de vitesse en sortie d'injecteur ;
- Afin d'identifier des échelles de coupure proportionnelles à une taille de maille, le maillage doit être le plus uniforme possible pour ne pas introduire des échelles diphasiques artificielles liées à une variation locale de la taille de maille.

### 5.1.1. Domaine de calcul et discrétisation spatiale

Le domaine de calcul étant identique à celui de la DNS, ses dimensions sont  $18.7 D_1 \times 5.8 D_1 \times 5.8 D_1$ , et est représenté sur la [Figure 5.1](#) (a). La discrétisation spatiale du domaine est réalisée avec un maillage non structuré de 96.5M mailles constitué de prismes sur les parois de l'injecteur, de tétraèdres partout ailleurs dans le domaine et de pyramides pour la transition entre ces deux formes géométriques de mailles. Ce maillage et ses caractéristiques sont identifiés par la notation LES-M96 dans la suite de ce manuscrit.

La répartition des mailles dans le domaine est représentée sur [Figure 5.1](#) (b). Une attention particulière est donnée au maillage de l'injection du liquide et du gaz ([Figure 5.1](#) (c)) afin d'obtenir un écoulement proche à celui de la DNS, point qui sera vérifié dans la [Section 5.1.4](#). Ceci passe par une coupure du développement de la couche limite proche à la DNS de référence. En ce sens, 4 couches de prismes sont appliquées sur les parois de l'injecteur avec une taille de premier prisme égale à la taille d'une maille DNS  $\Delta_{\text{DNS-M1}} = 0.17 \delta_{\text{lip}}$ . Les prismes ont ensuite une taille croissante avec un facteur d'étirement de 20%. Les tétraèdres suivent la même logique avec une taille croissante vers un maximum au centre de l'anneau de gaz à  $\Delta_{\text{LES-M96}} = 0.40 \delta_{\text{lip}}$  et du cylindre liquide à  $\Delta_{\text{LES-M96}} = 1 \delta_{\text{lip}}$ .

De plus, une zone de raffinement est créée autour de la lèvre de l'injecteur. Cette zone est critique car elle correspond à l'initiation des premiers tourbillons de la couche de mélange entre le liquide et le gaz. La lèvre étant de petite dimension et les fluides allant à leurs vitesses les plus élevées à cet endroit, cette contrainte est la plus limitante pour le maillage et pilote le coût de calcul. Deux mailles sont positionnées sur l'épaisseur de la lèvre, ce qui est insuffisant pour discrétiser correctement ces premiers tourbillons, mais en mettre un nombre supérieur rendrait le coût de calcul prohibitif. Cependant, la taille des tourbillons croît avec le développement de la couche de mélange diphasique, ainsi on peut s'attendre à ce que la taille de maille soit rapidement suffisante en aval pour les résoudre. Une des possibles conséquences de cet aspect du maillage sera présentée dans la [Section 6.5.3](#).

Dans la chambre, le maillage est défini de manière à capter les instabilités se développant sur l'interface liquide/gaz à l'origine de l'atomisation du jet liquide. Les longueurs d'onde des instabilités longitudinales  $\lambda_{\parallel} = 4.3 \delta_{\text{lip}}$  et transverses  $\lambda_{\perp} = 2.4 \delta_{\text{lip}}$  sont estimées à partir de l'[Equation 2.20](#) et de l'[Equation 2.24](#). En sortie d'injecteur, les tétraèdres ont une taille  $\Delta_{\text{LES-M96}} = 1 \delta_{\text{lip}}$ , soit 2.4 points pour décrire l'instabilité transverse, la plus petite échelle d'instabilité. Le maillage est ensuite légèrement raffiné jusqu'à  $\Delta_{\text{LES-M96}} = 0.84 \delta_{\text{lip}}$  loin de l'injecteur soit un peu moins de 3 points pour décrire  $\lambda_{\perp}$ . Ensuite, un déraffinement radial progressif est aussi opéré de  $\Delta_{\text{LES-M96}} = 0.84 \delta_{\text{lip}}$  à  $\Delta_{\text{LES-M96}} = 3.5 \delta_{\text{lip}}$  pour les rayons les plus élevés proche du fond de

chambre. Ainsi, dans le domaine, la taille de maille est constante à  $\Delta_{\text{LES-M96}} = 0.84 \delta_{\text{lip}}$  pour permettre d'identifier des échelles de coupure de toutes les structures liquides du domaine de calcul.

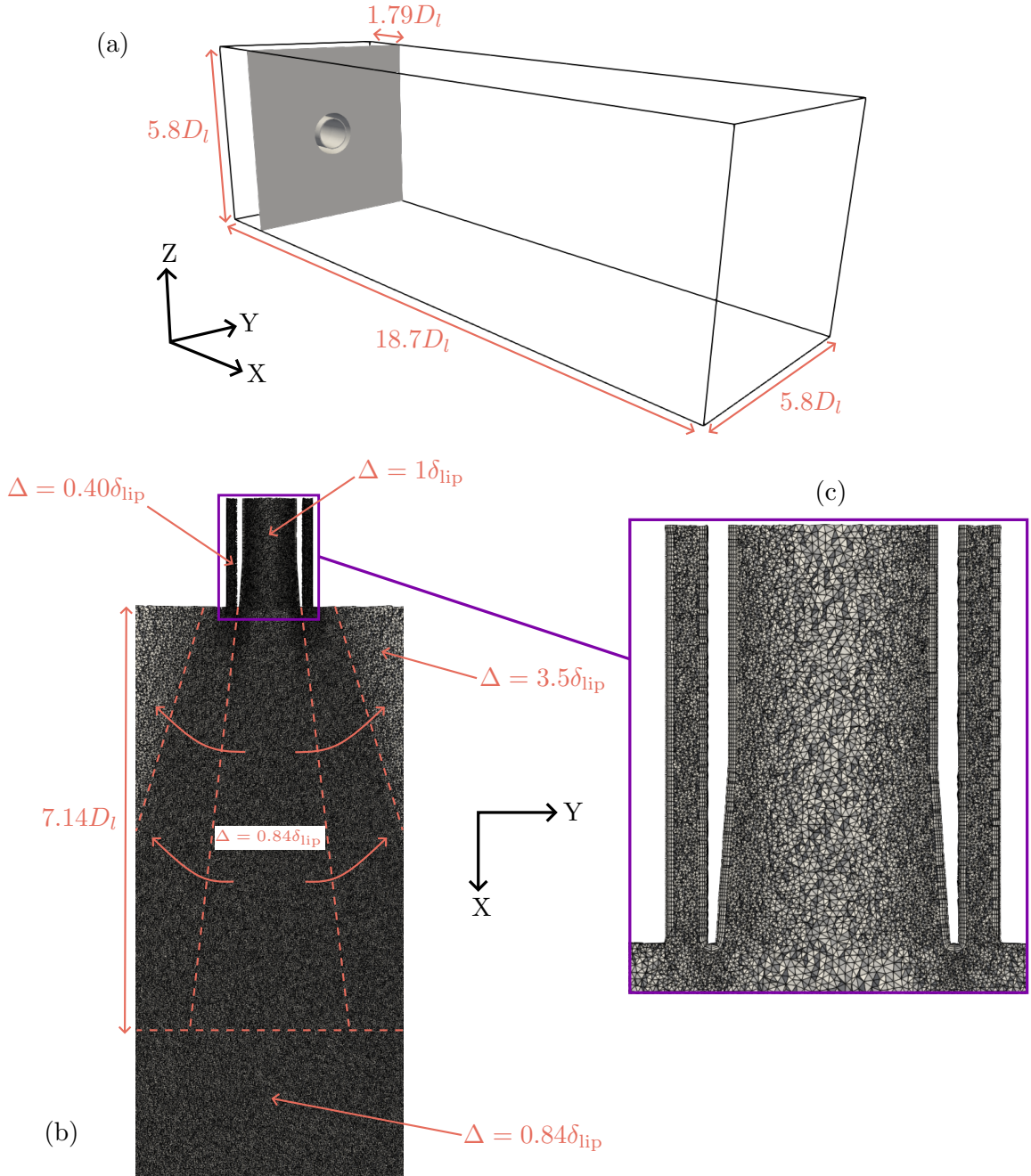


FIGURE 5.1. – Représentation du domaine de calcul et de sa discrétisation spatiale

### Conditions aux limites

Les conditions d'injection du liquide et du gaz correspondent à celles de la DNS, présentées dans la [Section 3.1.1](#). Pour être au plus proche des conditions aux limites de la DNS, les conditions aux limites CEDRE d'injection du liquide et du gaz sont choisies de type *entrée subsonique*. Cette condition impose un profil de vitesse d'injection uniforme et constant suivant la direction  $X$  qui correspond à l'axe de l'injecteur. Le fond de chambre, la lèvre et les limites latérales de l'injecteur sont des limites de *parois* immobiles et adiabatiques. Enfin, les conditions aux limites

de sortie pour toutes les faces de la chambre sont des *sorties subsoniques*. Une *réactualisation* est appliquée, permettant d'imposer les variables d'état sur les faces limites lorsque celles-ci ont un vecteur vitesse orienté vers l'intérieur du domaine de calcul, ce qui peut arriver de manière transitoire. Ainsi, la vitesse d'entrée du fluide sur une sortie est imposée nulle afin de décrire la sortie de tourbillons ou de structures liquides de manière identique à la DNS.

### 5.1.2. Modèles numériques

Dans cette étude, le code multi-physique CEDRE est utilisé, dont la modélisation diphasique a été présentée dans la [Section 3.2.4](#). L'objectif de cette étude étant de trouver des critères de résolution des grandes échelles liquides de l'atomisation, la simulation n'utilise que le solveur à phase séparés CHARME résolvant les équations de Navier-Stokes compressibles multi-fluides, multi-espèces. Il n'y a pas de modélisation de la phase liquide en sous maille, en conséquence l'interface liquide-gaz peut diffuser arbitrairement sous l'effet du maillage et de l'écoulement local. Les paramètres et les modèles utilisés dans la simulation sont donnés dans le [Tableau 5.1](#). Une différence notable par rapport à la simulation de [Rutard \[2019\]](#), hormis l'absence de modélisation du spray en sous maille, est l'utilisation du limiteur compressif de l'interface diphasique, introduit dans le [Paragraphe 3.2.2.3](#).

Fluide	Phase gaz : air <sup>1</sup> Loi gaz parfait <a href="#">Paragraphe 3.2.2.3</a>	Phase liquide : eau <sup>2</sup> Loi liquide compressible <a href="#">Paragraphe 3.2.2.3</a>
Thermodynamique	<ul style="list-style-type: none"> <li>• viscosité constante dans les deux phases</li> <li>• viscosité moyenne pondérée par fraction volumique de phase</li> </ul>	
Turbulence	Modèle Sigma <a href="#">Nicoud et al. [2011]</a> dans les deux phases ( $C_s = 1.35$ )	
Discrétisation spatiale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Méthode MUSCL multi-pente hybride</li> <li>• Limiteur compressif Overbee pour la fraction volumique de phase</li> <li>• Schéma HLLC avec correcteur bas Mach</li> </ul>	
Intégration temporelle	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Schéma implicite ordre 1</li> <li>• Pas de temps piloté par CFL = 1.4</li> </ul>	

TABLE 5.1. – Paramètres numériques et modèles de la simulation LES-M96

Les propriétés thermodynamiques des fluides en jeu dans la simulation sont données dans le [Tableau 5.2](#). La phase gazeuse est composée d'air<sup>1</sup>, et est modélisée par une loi d'état de gaz définie dans le [Paragraphe 3.2.2.3](#). La phase liquide, composée d'eau<sup>2</sup>, est décrite par une loi de liquide compressible définie dans le [Paragraphe 3.2.2.3](#). Cette dernière phase est le facteur limitant pour le calcul du CFL de la simulation. En effet, le CFL est donné par :

$$\text{CFL} = \frac{(\|u\| + \bar{c})dt}{\Delta}, \quad (5.1)$$

avec  $\bar{c}$  la vitesse du son du mélange des phases donné par l'[Equation 3.101](#) et :

$$\Delta = \frac{6V_{\text{cell}}}{S_{\text{cell}}}, \quad (5.2)$$

1. Propriétés modifiés de l'air, identiques à celles présentées dans la [Section 3.1.1](#)  
 2. Propriétés de l'eau adaptées dans la simulation LES, voir [Tableau 5.2](#)

la taille de la cellule définie comme un diamètre hydraulique. La vitesse du son étant beaucoup plus élevée dans le liquide que dans le gaz et les fluides de l'écoulement se déplaçant à un nombre de Mach  $M$  largement inférieur à 1 ( $M \sim 0.07$ ), le CFL maximal est atteint dans le liquide. Le coefficient de compressibilité du liquide  $\beta_0$  qui pilote la vitesse du son dans un liquide compressible (Equation 3.96) qui est de  $5 \times 10^{-10} \text{ Pa}^{-1}$  pour l'eau, est augmenté à  $1 \times 10^{-8} \text{ Pa}^{-1}$  afin de ne pas rendre les coûts de la simulation prohibitifs. Le code DNS DyJeAT ne traitant que des écoulements incompressibles, cette mesure n'est nécessaire que pour le code compressible CEDRE. Dans la configuration étudiée, l'écoulement peut être considéré incompressible, l'impact de la modification du coefficient de compressibilité de l'espèce liquide est supposée négligeable.

Gaz parfait (air <sup>1</sup> )	Liquide compressible (eau <sup>2</sup> )
$\gamma_g = 1.4$	$\rho_0 = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$
$r_g = 287.05 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$	$\alpha_0 = 3 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$
$c_g = 347 \text{ m.s}^{-1}$	$\beta_0 = 1 \times 10^{-8} \text{ Pa}^{-1}$
	$c_{p,l} = 4184 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$
	$c_l = 1423 \text{ m.s}^{-1}$

TABLE 5.2. – Exemple de propriétés thermodynamiques dans un gaz parfait et un liquide compressible avec estimation de leur vitesse du son

### 5.1.3. Stratégie de simulation

La simulation d'un écoulement diphasique implique des forts gradients de densité au niveau de l'interface diphasique malgré sa diffusion sur plusieurs mailles dans le cas d'une interface diffuse. Afin de limiter les problèmes numériques, notamment l'apparition d'ondes de pression purement numériques, mais aussi pour réduire le coût de la simulation, la stratégie pour réaliser la simulation est la suivante :

1. Le calcul est tout d'abord effectué sur un maillage plus grossier LES-T1 pour initialiser le calcul et évacuer une première partie du régime transitoire.
2. Le domaine est initialisé avec du gaz au repos sauf l'injecteur de liquide qui est rempli d'eau jusqu'à la position du chanfrein. Une rampe de vitesse d'injection du liquide est imposée sur plusieurs milliers d'itérations jusqu'à atteindre  $U_l$ .
3. Une fois que le jet liquide est sorti de l'injecteur sur une longueur de plusieurs  $D_l$ , le gaz est progressivement injecté à son tour avec une rampe de vitesse d'une dizaine de milliers d'itérations jusqu'à atteindre  $U_g$ .
4. Il faut que le liquide rentre dans la chambre de plusieurs  $D_l$  pour voir apparaître la déstabilisation du cœur liquide par le co-courant gazeux. Après l'apparition des premières instabilités interfaciales, la simulation est projetée sur un second maillage transitoire LES-T2 plus raffiné.
5. Le maillage LES-T2 permet d'observer les premières ruptures de cœur liquide. Enfin, la simulation est passée sur le maillage final LES-M96 précédemment décrit. La durée du transitoire sur le maillage LES-M96 est ainsi largement réduite, seules quelques ruptures de cœur liquide sont nécessaires pour l'évacuer. Les moyennes des champs et autres statistiques sur l'écoulement sont ensuite effectuées après que ce transitoire soit passé.

La partie suivante se concentre à montrer que les efforts réalisés sur la définition du maillage, les choix de méthodes numériques et l'application de la méthodologie présentée permettent de restituer un écoulement, et en particulier un régime d'atomisation similaire à celui de la DNS présentée dans la Section 3.1.1 mais sur des maillages bien plus grossiers.

### 5.1.4. Validation des conditions d'atomisation

Un champ instantané comportant plusieurs iso-surfaces de fractions volumiques de liquide à  $\alpha_l = 0.3$ ,  $\alpha_l = 0.5$  et  $\alpha_l = 0.9$  ainsi qu'une tranche longitudinale de la magnitude de vitesse sont représentés sur la [Figure 5.2](#). Le cœur liquide présente de nombreux plissements avec des ligaments en cours de détachement. La séparation de ligaments en structures de tailles variées peut être observée par la présence d'iso-surfaces fermées de fractions volumiques élevées. La tranche de vitesse met en évidence le cisaillement généré par l'injection de gaz sur le cœur liquide ainsi que la rapide décroissance de la vitesse du gaz lors de sa progression dans le domaine. Enfin, de nombreuses structures sont observées plus en aval de l'écoulement, issues à la fois de l'atomisation structurale et texturale ([Grout \*et al.\* \[2007\]](#), [Dumouchel \*et al.\* \[2019\]](#)). Bien que sur cette représentation, le choix des iso-surfaces met en évidence un grand nombre de structures contenant des cellules avec une fraction volumique de liquide élevée, des plus petites structures semblent être définies sur un ensemble de cellules possédant une fraction volumique de liquide faible. Cette observation fera l'objet d'une étude détaillée dans la [Section 5.2](#). Cependant, il est important de noter que le filtrage réalisé par le maillage et le choix d'une modélisation à interface diffuse réduit largement le nombre de structures liquides attachées et détachées du cœur liquide par rapport à la DNS, représentée sur la [Figure 4.3](#).

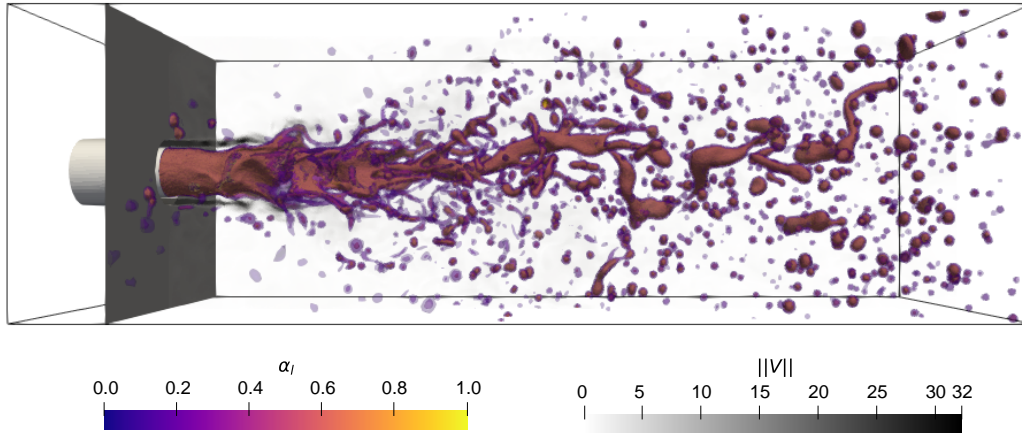


FIGURE 5.2. – Visualisation instantanée de l'interface liquide/gaz LES pour différentes fractions volumique de liquide  $\alpha_l$

Afin d'assurer une bonne comparaison entre la simulation LES-M96 et la DNS de référence ([Section 3.1.1](#)), il est nécessaire de s'assurer que le régime d'atomisation est similaire entre les simulations. S'il est relativement aisé d'obtenir les mêmes nombres adimensionnels identifiés dans le [Tableau 4.1](#) entre les simulations en imposant les mêmes conditions aux limites, ceci n'est cependant pas suffisant pour assurer les mêmes conditions pour l'atomisation texturale ([Section 2.1.3](#)), dont le plus grand nombre de structures liquides sont issues. En effet, le maillage de l'injecteur peut avoir une grande influence sur la résolution du spray, d'autant plus important lors de la comparaison entre une simulation LES et une DNS. En particulier l'atomisation assistée rencontrée lors d'une injection coaxiale est pilotée par le différentiel de vitesse entre le gaz et le liquide, il faut donc s'assurer que les vitesses du liquide et du gaz en sortie d'injecteur sont similaires entre la DNS et la simulation LES. Les profils de vitesse en sortie d'injecteur moyennés temporellement puis azimutalement de la DNS et de la LES sont tracés sur la [Figure 5.3](#). Le Reynolds liquide  $Re_l$  défini dans le [Tableau 4.1](#) étant faiblement turbulent le maillage proche des parois côté liquide est relativement peu raffiné pour obtenir un profil identique à celui de la DNS. Le gaz étant quant à lui très turbulent, le raffinement dans l'injecteur gaz est beaucoup plus important de manière à capter correctement la couche limite. Avec le maillage choisi, les profils de vitesse gaz de la DNS et de la LES sont en très bon accord. Une faible différence peut être observée sur les rayons les plus élevés mais n'est pas problématique car le cisaillement du liquide



par le gaz est localisé autour de  $r/D_l = 0.5$ .

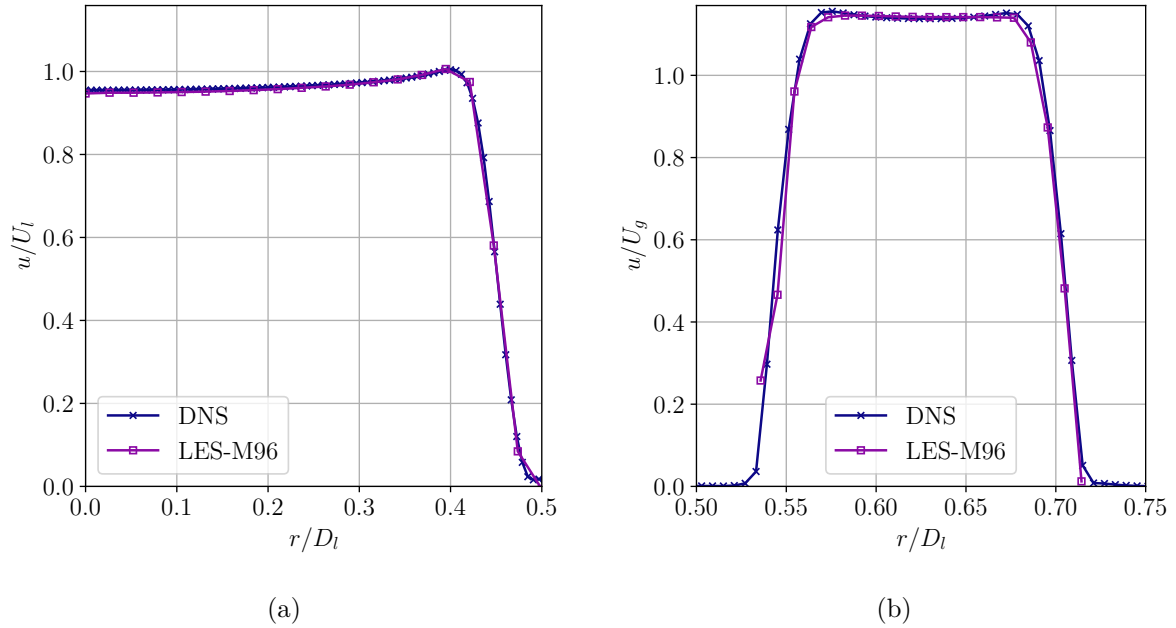


FIGURE 5.3. – (a) Profils de vitesse liquide et (b) gaz DNS et LES en sortie d'injecteur

Une fois les conditions d'injection vérifiées, la longueur de cœur liquide est un autre bon indicateur du régime d'atomisation et a déjà été utilisée sur la DNS dans la [Section 4.4.2.1](#) pour caractériser le régime transitoire. En effet, les corrélations de la littérature données dans la [Paragraphe 2.4](#) dépendent du  $Re$ , du  $We$  et du  $J$  de l'écoulement, les nombres adimensionnels pilotant l'atomisation. Si la mesure de la longueur de cœur liquide ne pose pas de problème avec une modélisation reconstruite de l'interface ([Section 4.4.2.1](#)), en interface diffuse elle dépend largement du choix de la valeur  $\alpha_l$  choisi. En effet, cette longueur peut diminuer significativement sous l'effet de la diffusion numérique à mesure que la valeur seuil tend vers 1.

L'évolution de la longueur de cœur liquide de la simulation LES-M96 est tracée sur la [Figure 5.4](#) pour trois seuils,  $\alpha_l = 1.0$ ,  $\alpha_l = 0.99$  et  $\alpha_l = 0.9$ , afin d'évaluer l'impact de la diffusion numérique. Les positions de changement de maillage pendant le transitoire (maillages LES-T1 et LES-T2) jusqu'au maillage final LES-M96 ainsi que la position du début du calcul des moyennes temporelles sont indiquées par des barres verticales. L'évolution de la longueur de cœur liquide de la simulation DNS de référence ([Figure 4.8](#)) est aussi tracée et positionnée arbitrairement à partir du moment de l'utilisation du maillage LES-M96 afin de pouvoir comparer les longueurs de cœur liquide. Celui-ci est défini comme la structure liquide attachée à l'injecteur par l'ensemble des cellules contiguës contenant une fraction volumique supérieure ou égale au seuil choisi. Sa longueur est la distance entre le fond de chambre et la position de la cellule appartenant au cœur maximale en  $X$ , calculée par un algorithme de [Tarjan \[1972\]](#) basé sur la théorie des graphes. Une première observation attendue est que la mesure de longueur de cœur liquide au seuil  $\alpha_l = 1$  donne des résultats significativement différents des deux autres mesures à  $\alpha_l = 0.9$  et  $\alpha_l = 0.99$ . En effet, avec cette valeur extrême de fraction volumique la diffusion de l'interface entraîne une "rupture" du cœur liquide à une position qui oscille peu ( $< 1 D_l$ ) aux alentours de  $3 D_l$ . En prenant en compte la diffusion de l'interface, il apparaît plus raisonné de choisir une valeur proche de 1 mais non strictement égale à 1. Les seuils  $\alpha_l = 0.9$ ,  $\alpha_l = 0.99$  montrent ainsi un battement semblable mais différent du seuil  $\alpha_l = 1$ , avec des ruptures de cœur liquide qui font varier de plus de  $5 D_l$  la longueur de cœur liquide. La même amplitude de battements est observée sur la DNS mais aussi des valeurs très similaires de longueur de cœur liquide moyens,  $7.93 D_l$  pour la DNS,  $9.75 D_l$  pour la LES-M96 avec un seuil  $\alpha_l = 0.9$  et  $7.85 D_l$  pour la LES-M96 avec un seuil  $\alpha_l = 0.99$ . L'étude de l'évolution du cœur liquide est non seulement un traqueur du passage du transitoire mais est aussi premier indice sur la comparabilité de ces simulations en terme de régime d'atomisation.

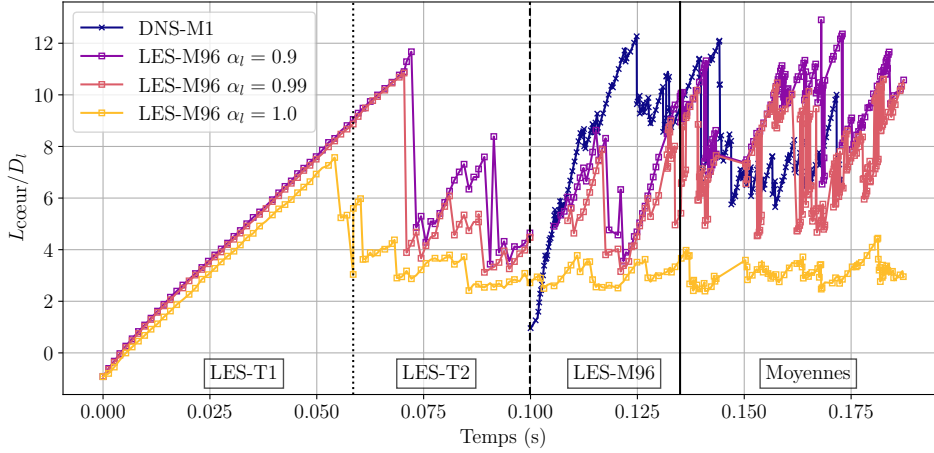


FIGURE 5.4. – Longueurs de cœur liquide LES pour  $\alpha_l = 0.9, 0.99, 1.0$  et DNS-M1 avec les positions des changements de maillage LES-T1 vers LES-T2 et LES-T2 vers LES-M96

Ainsi, les choix de modèles et de paramètres pour la simulation LES du spray résolu de la configuration coaxiale choisie, définis dans ce chapitre mènent à un régime d'atomisation similaire entre la LES et la DNS. Ceci permet d'assurer que les résultats de la simulation LES-M96 et DNS sont comparables et d'expliquer les différences obtenues par le filtrage LES et les différences de modélisation.

## 5.2. Identification d'échelles de coupure diphasique

L'objectif de cette section est de quantifier les échelles de coupure diphasique du spray à interface diffuse généré sur la simulation LES-M96 par deux méthodes, l'une en se ramenant à une interface reconstruite et l'autre en considérant toute la diffusion de l'interface des structures liquides. En particulier, deux grandeurs, le volume et la surface (2<sup>ème</sup> méthode) des structures liquides diffuses sont quantifiées pour estimer des échelles de coupure grâce à la DNS.

### 5.2.1. Interprétation reconstruite

Une première manière pour estimer les caractéristiques d'une structure diffuse est de considérer l'interface entre le liquide et le gaz comme étant infiniment mince malgré sa diffusion et est positionnée à une valeur de fraction volumique de liquide. Le choix le plus évident de la fraction volumique de liquide à laquelle est considérée l'interface est  $\alpha_l = 0.5$ . Comme illustré sur la Figure 5.5 cette valeur de seuil conserve le volume de la structure liquide. Elle donne ainsi une représentation du volume minimal occupé par une structure liquide diffusée et donc une estimation de sa taille sans diffusion de l'interface ( $d_{30} = V^{1/3}$ ). Cependant, cette représentation exclut toutes les structures diffuses ne comportant pas de fraction volumique de liquide  $\alpha_l = 0.5$ . Ce point particulier sera investigué dans le Paragraphe 5.2.1.2.

Cette première interprétation d'une interface diffuse est évaluée dans un premier temps sur une configuration plus simple que celle d'injection coaxiale présentée dans la Section 5.1.1.

#### 5.2.1.1. Cas de convection d'une goutte

On se concentre sur une goutte liquide isolée dont on connaît les caractéristiques en terme de surface et volume afin de pouvoir évaluer la méthode précédemment décrite. Les propriétés thermodynamiques du liquide et du gaz ainsi que les choix numériques (schéma, limiteur compressif) sont choisis identiques à ceux du cas d'intérêt présenté dans la Section 5.1.

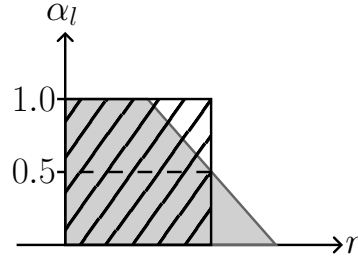


FIGURE 5.5. – Illustration de la considération reconstruite à l'iso-surface  $\alpha_l = 0.5$  d'une structure liquide diffuse 1D

La goutte est convectée dans un canal de forme cubique de côté  $20\Delta_{\text{conv}}$  et de longueur  $200\Delta_{\text{conv}}$ , avec  $\Delta_{\text{conv}} = 1$  mm une taille de maille fixée arbitrairement. Pour convecter la goutte, une injection de gaz est imposée d'un côté du domaine et une sortie du côté opposé. Des parois glissantes à la vitesse d'injection du gaz sont imposées sur les faces latérales du domaine afin de ne pas accélérer la goutte avec le développement de couches limites. La goutte est initialisée sphérique dans le domaine à l'état initial avec un diamètre initial  $d_{30} = 5\Delta_{\text{conv}}$ . Cette taille permet d'assurer que la goutte contient au moins une cellule avec  $\alpha_l = 1$  qui sera nécessaire par la suite (voir Section 5.2.2.3). Sa vitesse initiale est identique à celle du flux d'air imposé sur la condition d'entrée ce qui lui donne un  $We = 0$  et empêche ainsi sa fragmentation et sa déformation. Une représentation en coupe du domaine et du champ de fraction volumique est donnée dans la Figure 5.6.

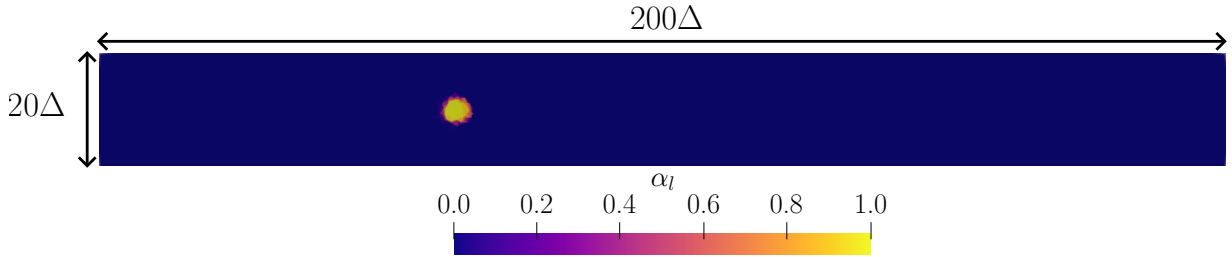


FIGURE 5.6. – Domaine de calcul du cas de convection de goutte

### Adaptation des données pour l'analyse

En se ramenant à une interface diphasique infiniment mince, l'objectif est de pouvoir utiliser l'outil d'analyse de spray AlgoDetect présenté dans la Section 4.4.1 et utilisé pour caractériser le spray DNS dans la Section 3.1.1. Le solveur multiphysique CEDRE traitant uniquement des maillages non structurés généraux il est nécessaire d'interpoler les champs de fraction volumique de liquide  $\alpha_l$  sur un maillage cartésien régulier. Afin de pouvoir interpoler des solutions de maillages non structurés d'une centaine de millions de mailles sur des maillages cartésien au moins tout aussi gros, l'outil parallèle MAIA (<https://github.com/onera/Maia>) a été utilisé. Entre autres, il permet de lire, de partitionner des champs non structurés, puis de les interpoler sur un autre maillage, cartésien ou non, de manière efficace sur un grand nombre de processus parallèles.

Le maillage cartésien régulier d'interpolation ( $64\Delta_{\text{conv}} \times 64\Delta_{\text{conv}} \times 640\Delta_{\text{conv}}$ ) est volontairement choisi plus raffiné afin de restituer au mieux les champs de fraction volumique de liquide  $\alpha_l$  du maillage non structuré initial. Le résultat de l'interpolation de la goutte sur un instant est représenté sur la Figure 5.7.

L'interface est positionnée à  $\alpha_l = 0.5$ , qui peut être visualisée par un iso-contour sur la Figure 5.8. Cette goutte ayant été imposée comme sphérique à l'état initial et ayant un  $We = 0$ , elle



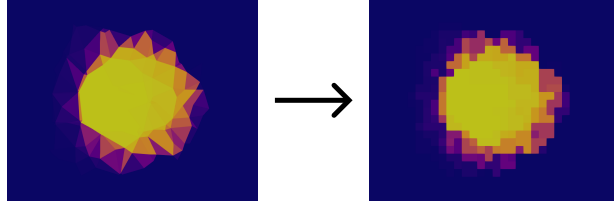


FIGURE 5.7. – Interpolation du champ de fraction volumique de liquide  $\alpha_l$  sur un maillage cartésien grâce à MAIA

est supposément sphérique mais apparaît déformée avec l'iso-contour  $\alpha_l = 0.5$ . En effet, la structure liquide et donc les iso-contours de fraction volumique de liquide, épousent les tétraèdres du maillage non structuré lors de sa convection. Considérer l'interface d'une structure liquide comme l'iso-surface d'une fraction volumique donnée sans traitement supplémentaire revient donc à tracer un iso-contour du maillage local et déforme complètement la forme apparente de la structure liquide, ce qui engendrerait une erreur importante sur la mesure de surface.

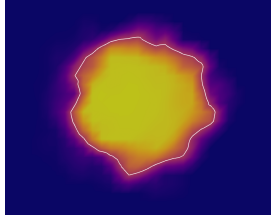


FIGURE 5.8. – Iso-contour  $\alpha_l = 0.5$  sur une goutte sphérique

Pour limiter l'influence du maillage tétraédrique initial et retrouver la forme sphérique de la goutte, un filtrage est appliqué au champ de fraction volumique de liquide déjà interpolé. Cette opération s'apparente à l'application d'un flou sur le champ de fraction volumique de liquide pour lisser l'interface diphasique. Le filtrage est centré avec un noyau gaussien donné par l'Equation 5.3 :

$$K(i, j, k) = \frac{1}{\sigma^3(2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{i^2 + j^2 + k^2}{2\sigma_{\text{gauss}}^2}}. \quad (5.3)$$

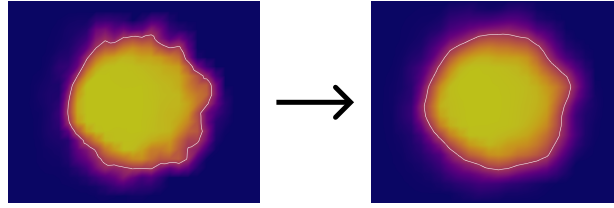
L'écart type est fixé à  $\sigma_{\text{gauss}} = 0.8$  et la taille du filtre à 27 mailles (toutes les mailles adjacentes). Un exemple 2D de noyau gaussien approximé sur 9 mailles avec  $\sigma_{\text{gauss}} = 0.8$ , communément utilisé en analyse d'images, est donné dans la Figure 5.9.

$$\frac{1}{16} \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 4 & 2 \\ \hline 1 & 2 & 1 \\ \hline \end{array}$$

FIGURE 5.9. – Noyau filtrage gaussien 2D approximé sur 9 mailles avec  $\sigma_{\text{gauss}} = 0.8$

Une comparaison d'iso-surface  $\alpha_l = 0.5$  avant et après le filtrage est tracée sur la Figure 5.10. Cette figure montre une amélioration significative sur la sphéricité de la goutte après le filtrage. Cependant cette opération doit être utilisée avec précaution, un filtrage trop important pourrait rendre sphériques des structures qui ne le sont pas et poser problème lors de fortes densités de structures liquides.

Pour permettre à AlgoDetect d'identifier les mailles d'une même structure liquide il faut que le champ de fraction volumique de liquide soit celui d'une simulation à interface reconstruite. Pour cela, on applique une binarisation du champ au seuil  $\alpha_l = 0.5$  : toutes les cellules ayant une fraction volumique de liquide supérieure à 0.5 sont considérées comme étant pleines de liquide

FIGURE 5.10. – Goutte et iso-surface  $\alpha_l = 0.5$  avant et après filtrage

et toutes les autres comme étant vides. Cette opération de binarisation est représentée sur la Figure 5.11. Une fois les cellules de la structure liquide identifiées, ses caractéristiques (volume et surface), sont néanmoins mesurées sur les champs filtrés.

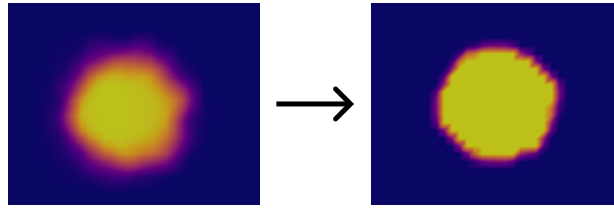


FIGURE 5.11. – Seuillage de la goutte filtrée

### Précision de la méthode

Le volume de la goutte est ensuite calculé par intégrale de la fraction volumique de liquide  $\alpha_l$  et sa surface par une reconstruction PLIC (Paragraphe 3.2.1.2) comme pour une structure reconstruite classique. La goutte étant initialisée sphérique avec un  $d_{30} = 5\Delta_{\text{conv}}$ , son volume et sa surface exacte sont ainsi connus et servent de référence. Une comparaison du volume et de la surface mesurées en considérant l'interface comme reconstruite avec la référence est donnée dans le Tableau 5.3. Ainsi, la méthode présentée dans cette section permet donc d'obtenir une erreur  $< 2\%$  sur la mesure de volume et de surface pour une goutte isolée avec le maillage d'interpolation choisi.

Volume	Surface
-1.6%	+1.7%

TABLE 5.3. – Écart à la référence pour les mesures de volume et de surface sur une goutte isolée

Il est important de noter que cette méthode donne des résultats satisfaisants sur le cas convectif de goutte avec le maillage considéré. Raffiner le maillage d'interpolation doit permettre de faire converger les mesures de volume et surface vers leurs valeurs de référence.

#### 5.2.1.2. Application au cas coaxial

Après avoir montré la pertinence de la méthode sur une configuration de convection de goutte isolée, la méthode est appliquée aux champs de la simulation détaillée dans la Section 5.1. L'objectif est de quantifier la taille des structures liquides de l'écoulement afin d'identifier un critère de résolution, autrement dit l'échelle de coupure en taille de structure imposée implicitement par le maillage. Les champs instantanés de fraction volumique de liquide  $\alpha_l$  sont interpolés sur un maillage cartésien régulier  $768 \times 256 \times 256$ . Le filtre et le seuillage sont choisis identiques à ceux présentés dans le Paragraphe 5.2.1.1.

## Échelle de coupure en volume

Comme montré dans la Section 4.4.2.2, une comparaison de PDFs de taille de structures liquides avec rescaling permet d'identifier des échelles de coupure diphasique en localisant l'endroit où les PDFs ne se superposent plus. Afin d'identifier une échelle de coupure diphasique LES, les PDFs des structures liquides LES<sup>3</sup> sont tracées avec celles de la DNS sans et avec rescaling. La LES simulant les grandes structures diphasiques de l'écoulement, l'échantillonnage de la distribution ainsi que le facteur de lissage de l'estimation par noyau gaussien sont adaptés et choisis dix fois plus grands que celui qui avait été choisi pour l'identification d'échelles de coupure DNS. Les PDFs DNS et LES avec interprétation reconstruite sont tracées sur la Figure 5.12. Les tailles de structures  $d_{30} = V^{1/3}$  sont adimensionnées par  $\Delta_{\text{LES-M96}}$  la taille de maille LES. Sur la Figure 5.12 (a), la PDF LES montre que le plus grand nombre de structures liquides détectées se situe aux alentours de  $5\Delta_{\text{LES-M96}}$ . Ceci correspond aussi à la localisation de la fin de superposition de toutes les PDFs avec rescaling de la Figure 5.12 (b), indiquant une échelle de coupure diphasique LES.

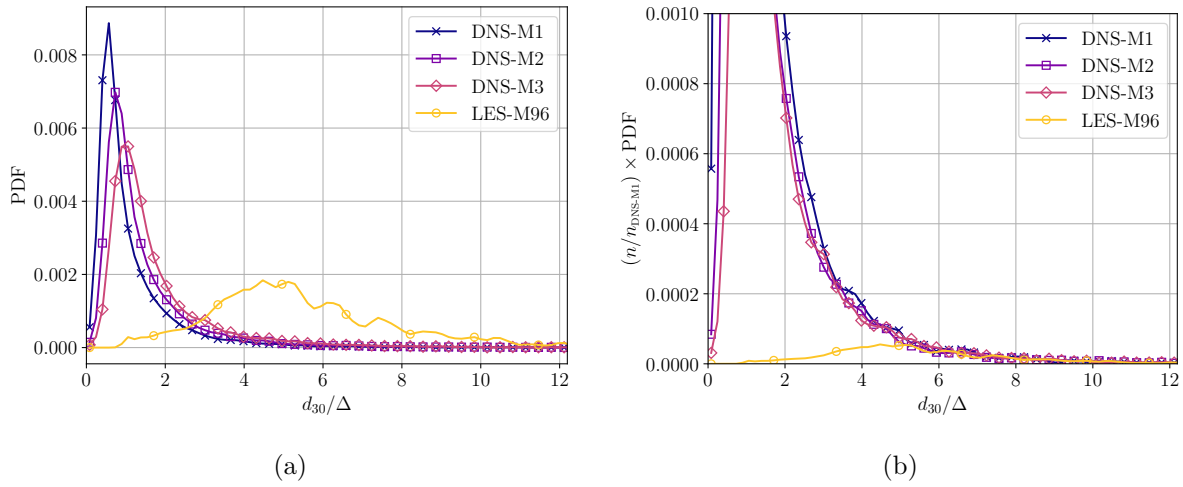


FIGURE 5.12. – Comparaison des PDFs DNS et LES avec interprétation reconstruite, (a) sans rescaling et (b) avec rescaling et agrandie sur la PDF LES-M96

## Limitations de la méthode

Cependant, il est important de noter que cette méthode fait des hypothèses fortes qui limitent la détection et la précision sur la mesure des caractéristiques des structures liquides. Un premier point est que toutes les structures liquides comportant uniquement des mailles avec une fraction volumique inférieure à 0.5 ont été éliminées lors de l'opération de seuillage, ce qui limite considérablement le nombre de structures liquides détectées. En effet, comme observé sur le champ brut instantané de fraction volumique de liquide de la Figure 5.13, beaucoup de structures liquides ne contiennent que des cellules avec une fraction volumique de liquide faible. Les structures liquides ayant passé le filtre de seuillage peuvent être visualisées sur le champ seuillé de la Figure 5.14. Le grand nombre de structures liquides de petite taille non prises en compte dans la statistique de taille sont à l'origine de la forme surprenante de la PDF, qui devrait être log-normale comme celle des DNS.

De plus l'opération de seuillage peut augmenter artificiellement le volume d'une structure liquide. En effet, le cas de figure illustré par la Figure 5.5 n'est pas toujours vérifié, certaines structures pouvant avoir des cellules dont la fraction volumique est supérieure à 0.5 mais aucune cellule avec  $\alpha_l = 1$ . Dans ce cas de figure, dont un exemple est donné en Figure 5.15, le seuillage

3. Les indices DI pour *Diffuse Interface* et RI pour *Reconstructed Interface* sont ajoutés aux notations des simulations afin d'appuyer sur les différences de modélisation de l'interface entre la LES et la DNS

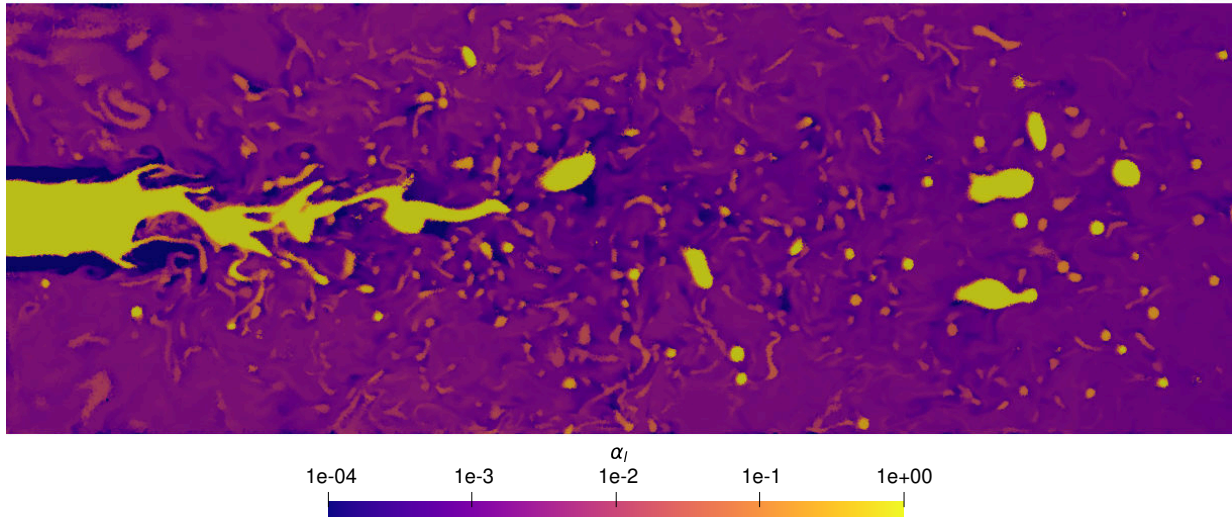
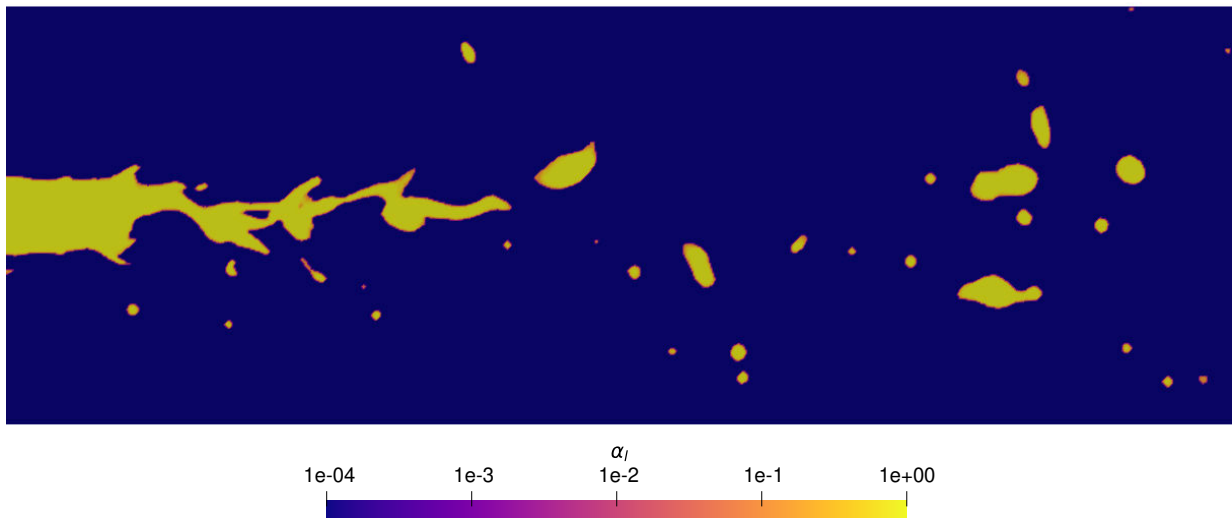


FIGURE 5.13. – Champ instantané brut de fraction liquide volume en échelle logarithmique

FIGURE 5.14. – Champ instantané de fraction liquide volume seuillé à  $\alpha_l = 0.5$ 

remplit la structure de liquide jusqu'à la valeur seuil ce qui entraîne une surestimation de son volume.

De par la sur-estimation du volume de certaines structures liquides et la non détection des structures liquides les plus diffusées, cette méthode qui revient à identifier une structure liquide par une iso-surface  $\alpha_l = 0.5$ , ne permet pas de caractériser précisément l'écoulement diphasique LES simulé.

### 5.2.2. Interprétation diffuse

Afin de pallier aux problématiques de l'interprétation reconstruite, il devient nécessaire de ne plus se limiter à considérer l'interface à une fraction volumique donnée mais d'en considérer toute son épaisseur, des plus petites valeurs de fraction volumique aux plus élevées. Dans un premier temps cette nouvelle méthode de mesure de caractéristiques de structures liquides est présentée et étudiée sur le cas de convection de goutte avant d'être appliquée sur le jet coaxial.

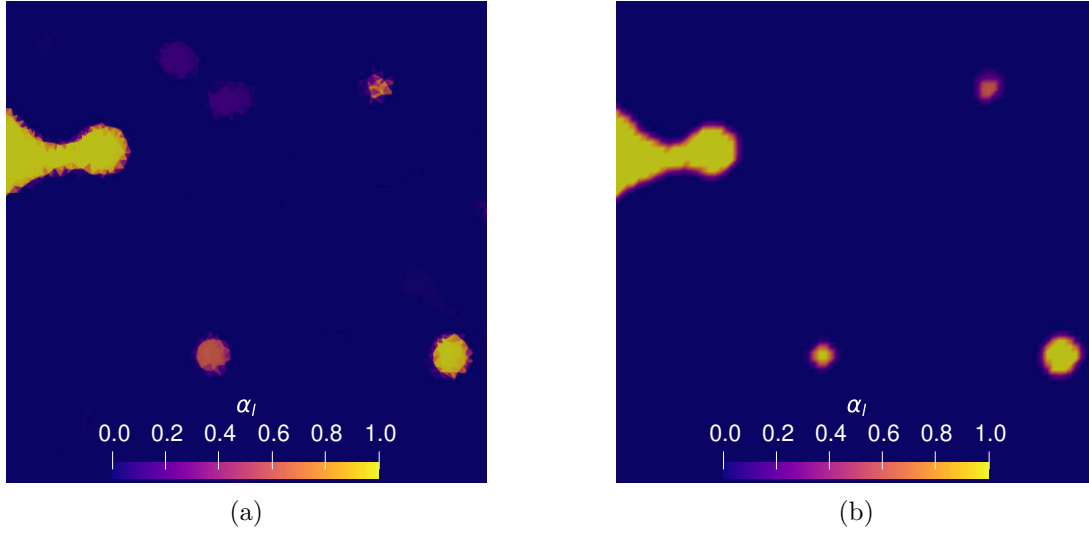
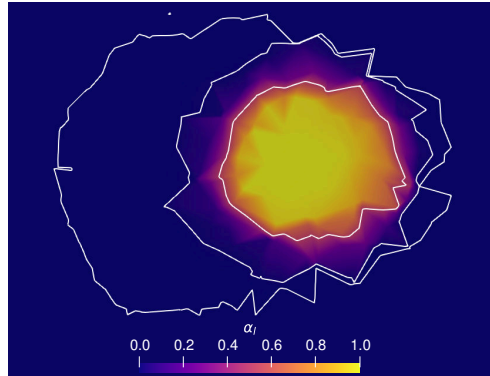


FIGURE 5.15. – (a) Structures liquides brutes et (b) après seuillage

### 5.2.2.1. Principe de mesure

Considérer l'ensemble des fractions volumiques pour une structure liquide diffuse nécessite de redéfinir la manière de distinguer une structure liquide de son environnement. Pour cela, on choisit un seuil de fraction volumique minimal et on considère que toutes les cellules contiguës ayant une fraction volumique supérieure à ce seuil font partie de la structure liquide. Trois seuils de fraction volumique de liquide  $\alpha_{\text{seuil}} = 10^{-5}$ ,  $10^{-2}$ ,  $0.5$  sont tracés dans la Figure 5.16 sur le champ brut pour l'exemple sur la goutte du cas convectif. Les caractéristiques de la structure liquide ainsi isolée sont déterminées pour toutes les cellules situées à l'intérieur du volume dessiné par l'iso-surface correspondante.


 FIGURE 5.16. – Goutte brute avec iso-contours  $\alpha_{\text{seuil}} = 10^{-5}$ ,  $10^{-2}$ ,  $0.5$ 

Dans cette section on se concentre sur deux grandeurs spécifiques, le volume, déterminé avec l'intégrale de la fraction volumique de liquide dans le domaine  $\Omega$  jusqu'à la valeur seuil de fraction volumique, et la surface par intégrale du gradient de la fraction volumique jusqu'à la valeur seuil de fraction volumique, comme suit :

$$V = \int_{\Omega} \alpha_l \, d\Omega \quad \text{si } \alpha_l > \alpha_{\text{seuil}} , \quad (5.4)$$

$$S = \int_{\Omega} \nabla \alpha_l \, d\Omega \quad \text{si } \alpha_l > \alpha_{\text{seuil}} . \quad (5.5)$$

La goutte étant seule dans le domaine, une mesure de référence est réalisée sur le maillage

initial non structuré en intégrant sur tout le domaine les grandeurs associées à son volume et à sa surface.

### Sans filtrage

Dans un premier temps on interpole uniquement le champ non structuré sur un maillage cartésien régulier sans filtrage car cette opération n'est, a priori, plus nécessaire. Les mesures sont réalisées pour différents seuils de détection allant de  $\alpha_{\text{seuil}} = 10^{-5}$  à  $\alpha_{\text{seuil}} = 0.5$  afin d'étudier l'impact du choix sur la précision des résultats. En comparant les mesures à la référence, une estimation d'erreur de la méthode pour différents choix de seuil est tracée sur la [Figure 5.17](#). Pour un  $\alpha_{\text{seuil}}$  élevé ( $\alpha_{\text{seuil}} = 0.5$ ) 18% du volume de la goutte est inclus dans des cellules ayant  $\alpha_l < \alpha_{\text{seuil}}$  et est donc perdu lors de la mesure. Cette erreur tend vers 0% lorsque le seuil devient faible. L'erreur est beaucoup plus importante sur le gradient ( $> 40\%$ ) pour un seuil élevé, i.e.  $\alpha_{\text{seuil}} > 10^{-1}$  et est non nulle aux alentours des  $-10\%$  pour des seuils faibles.

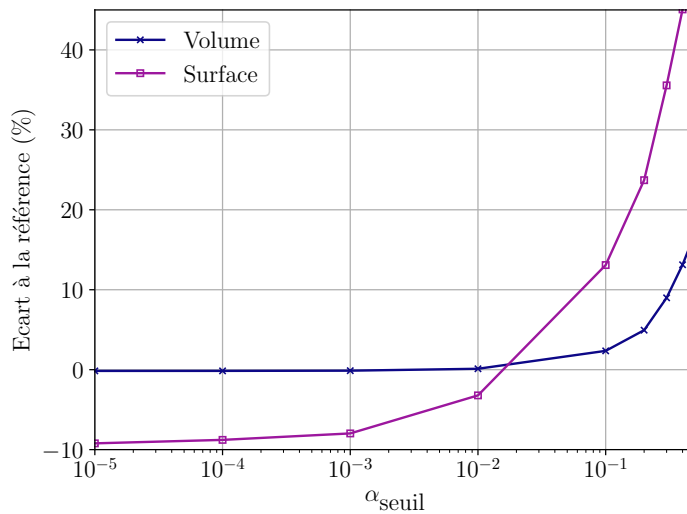


FIGURE 5.17. – Erreur estimation volume et surface sans filtrage

La méthode fonctionne donc convenablement pour la mesure de volume mais présente une erreur conséquente sur la mesure de surface. Cette imprécision est causée par un raffinement du maillage cible non suffisant pour estimer précisément un gradient, ce qui entraîne une erreur importante sur l'estimation de la surface de la goutte.

### Avec filtrage

Afin de pallier ce problème, une solution pourrait être d'utiliser un maillage cible beaucoup plus raffiné que le maillage non structuré afin de mieux discrétiser le gradient de fraction volumique de liquide. Cependant, cette solution, bien que viable sur un cas simple de convection de goutte, nécessiterait un maillage cible au moins aussi raffiné que celui de la DNS lors de son application sur le cas coaxial, ce qui augmenterait excessivement les coûts de calcul. Une autre solution étudiée dans cette partie est de filtrer le champ interpolé afin de tenter de retrouver une bonne estimation du gradient tout en limitant l'impact du maillage cible. Un filtre avec noyau gaussien identique à celui présenté dans le [Paragraphe 5.2.1.1](#) est appliqué. La [Figure 5.18](#) trace l'estimation de l'erreur sur la mesure de volume et de surface après avoir filtré le champ de fraction volumique de liquide. On observe une erreur sensiblement identique sur la mesure du volume avec filtrage donnant une erreur maximale de 13% pour  $\alpha_{\text{seuil}} = 0.5$ . De plus, une décroissance rapide de l'erreur pour des  $\alpha_{\text{seuil}}$  plus faibles est aussi observée. Enfin, le résultat majeur concerne la mesure de surface qui est très nettement améliorée avec l'utilisation d'un filtrage. En effet, pour les  $\alpha_{\text{seuil}}$  les plus faibles

( $10^{-2}$ ), l'erreur sur la mesure de surface est de 1%, bien plus faible que les 10% obtenus sur les champs non filtrés.

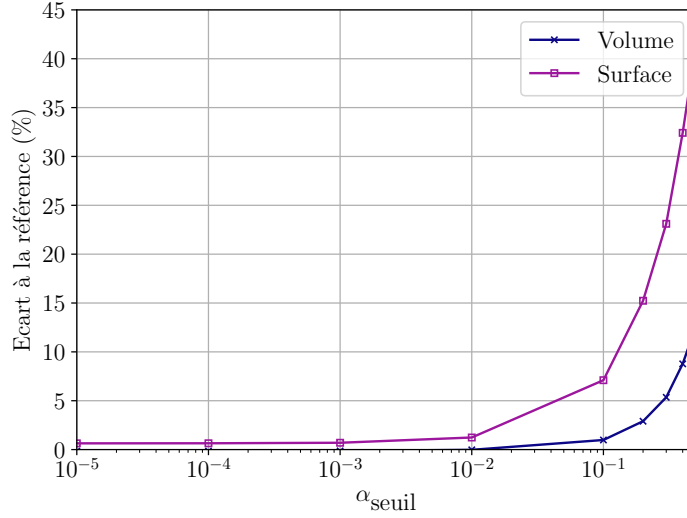


FIGURE 5.18. – Erreur faite sur l'estimation du volume et de la surface avec filtrage du champ de fraction volumique de liquide

Ainsi, cette étude sur un cas simplifié a permis de montrer qu'avec un choix adapté de  $\alpha_{\text{seuil}}$ , le volume et la surface d'une structure liquide peuvent être déterminés avec une erreur de  $\leq 1\%$  en considérant l'ensemble du champ de fraction volumique de liquide. L'intérêt du filtrage pour la mesure de surface a aussi été démontré et sera appliqué pour tous les résultats des sections suivantes.

### 5.2.2.2. Échelle de coupure en volume

Afin de déterminer une première échelle de coupure pour cette méthode basée sur la mesure de volume, on l'applique au cas coaxial. Avant toute chose, il faut choisir un seuil de fraction volumique adapté. En première approche, on peut penser avec la Figure 5.18 qu'il suffit de choisir un seuil très faible pour avoir une précision maximale mais ce n'est pas le cas dans un champ avec de multiples structures liquides. Pour comprendre cela, la Figure 5.19 montre 3 champs instantanés avec des iso-contours de fraction volumique de liquide à  $10^{-1}$ ,  $10^{-2}$  et  $10^{-3}$ . Une première observation évidente est qu'en choisissant  $\alpha_{\text{seuil}} = 10^{-1}$ , un faible nombre de structures liquides est détecté et mènerait à une erreur de 2% sur la mesure de volume et 7% sur la surface d'après l'étude réalisée dans la section précédente. Au contraire, en choisissant un seuil trop faible, par exemple  $\alpha_{\text{seuil}} = 10^{-3}$ , cela entraîne une agglomération artificielle des structures, où tout le liquide se retrouve identifié comme faisant partie d'une seule et même structure liquide. Ainsi, un compromis est choisi :

$$\alpha_{\text{seuil}} = 10^{-2}, \quad (5.6)$$

qui permet à la fois de détecter un grand nombre de structures liquides tout en gardant une grande précision sur la mesure de volume et la surface ( $\sim 0\%$  et  $2\%$  d'erreur respectivement).

Après avoir choisi  $\alpha_{\text{seuil}} = 10^{-2}$ , la mesure de volume et de surface est appliquée à l'ensemble des structures liquides détectées. Comme pour le Paragraphe 5.2.1.2 les PDFs obtenues par la LES sont comparées à celles obtenues avec la DNS dans la Figure 5.20. La PDF de la LES retrouve sa forme log-normale attendue avec un pic aux alentours de  $1\Delta_{\text{LES-M96}}$ . Avec le rescaling présenté dans la Section 4.4.2.2, en comparant jusqu'à quel volume les PDFs se superposent, une échelle de coupure en volume est identifiée à :



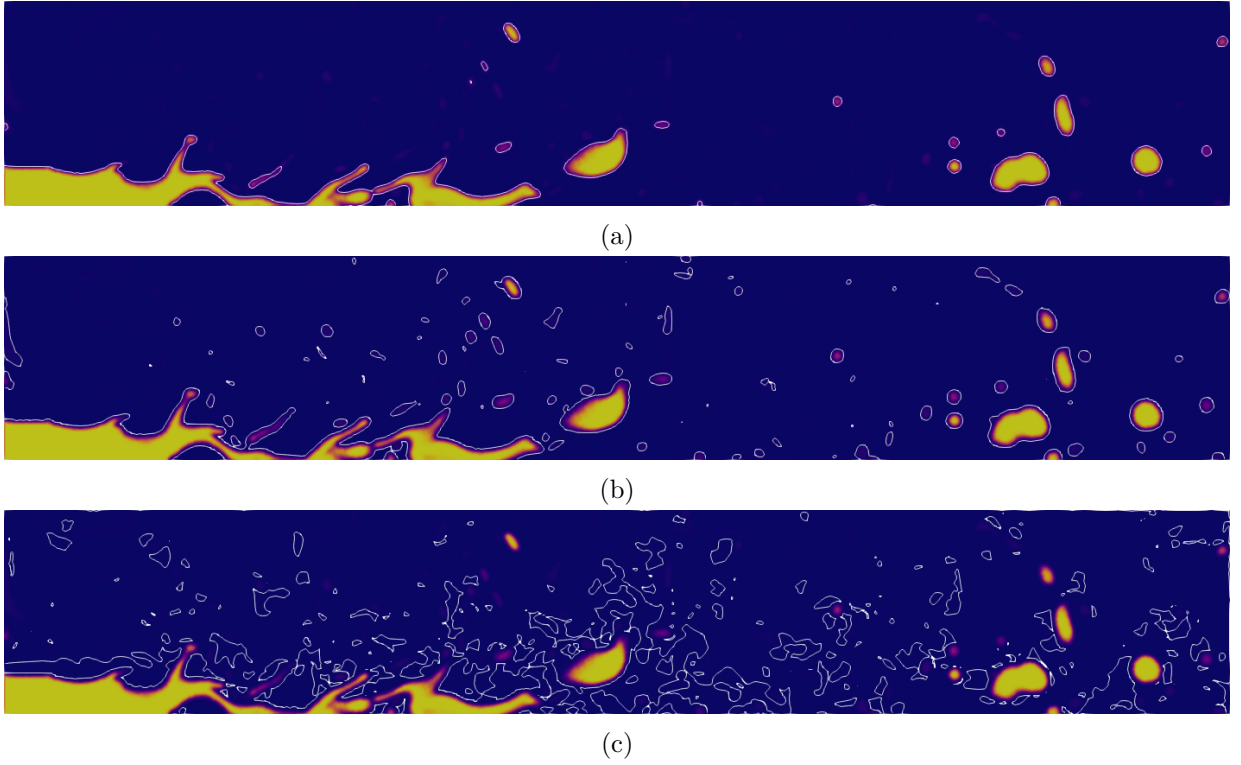


FIGURE 5.19. – Champs instantanés de fraction volumique de liquide avec iso-contours (a)  $10^{-1}$ , (b)  $10^{-2}$  et (c)  $10^{-3}$

$$d_{30} = V^{1/3} = 4\Delta_{\text{LES-M96}} . \quad (5.7)$$

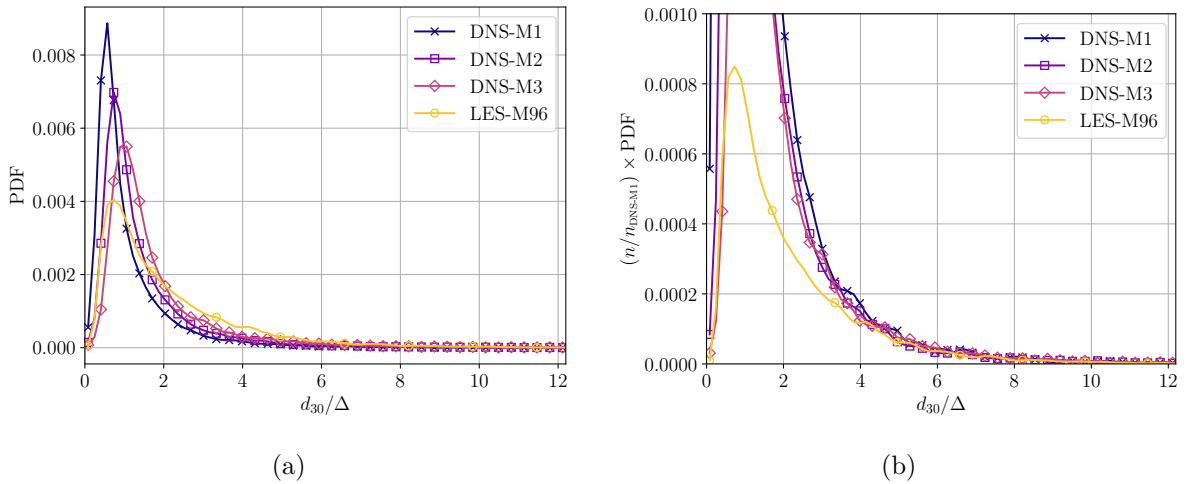


FIGURE 5.20. – Comparaison des PDFs des DNS et de la LES avec une interprétation diffuse, (a) sans rescaling et (b) avec rescaling, agrandie sur la PDF LES-M96

Une autre manière d'identifier cette échelle de coupure est de filtrer les PDFs LES et DNS jusqu'à ce qu'elles soient identiques, comme réalisé dans la [Section 4.4.2.2](#) sur les DNS de référence. Dans ce but, les PDFs filtrées à  $2\Delta_{\text{LES-M96}}$  et  $4\Delta_{\text{LES-M96}}$  sont tracées sur la [Figure 5.21](#). Le filtrage à  $2\Delta_{\text{LES-M96}}$  met en évidence que cette échelle de coupure n'est pas suffisante pour superposer la PDF LES à celles de la DNS sur tout le spectre des tailles (qui ont une échelle de coupure beaucoup plus petite). On en conclut que l'échelle de coupure diphasique LES basée sur le volume est plus grande que  $2\Delta_{\text{LES-M96}}$ . Le filtrage à  $4\Delta$  montre quand à lui qu'avec cette échelle de coupure,



toutes les PDFs sont identiques et donc que l'échelle de coupure LES est bien  $d_{30} \leq 4\Delta_{\text{LES-M96}}$ .

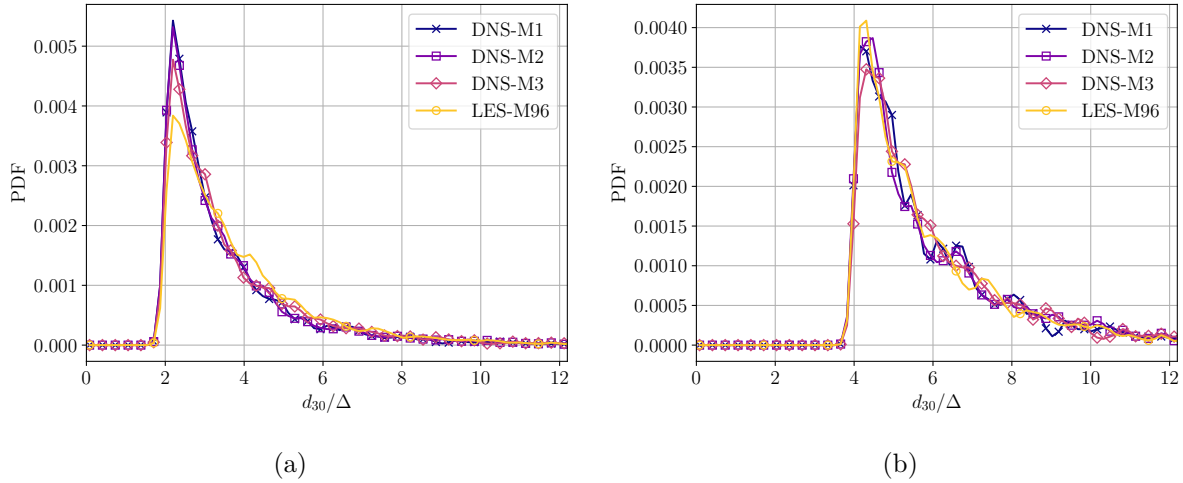


FIGURE 5.21. – Filtrage des PDFs LES et DNS à (a)  $2\Delta_{\text{LES-M96}}$  et (b)  $4\Delta_{\text{LES-M96}}$

Cette section a permis d'identifier une échelle de coupure à  $4\Delta_{\text{LES-M96}}$  basée sur le volume des structures liquides. La mesure de surface n'a pas encore été analysée, elle fait l'objet de la prochaine section.

### 5.2.2.3. Résolution en surface

Dans cette section, l'objectif est d'évaluer une échelle de coupure portant sur une estimation de la surface des structures liquides. En particulier, on se demande si la mesure de surface par le gradient de fraction volumique est précise pour toutes les structures résolues en volume ( $d_{30} > 4\Delta_{\text{LES-M96}}$ ). En effet, une erreur supplémentaire sur l'estimation de surface, non causée par l'interpolation ou le filtrage, apparaît pour les structures liquides ne possédant pas de cellule avec une fraction volumique  $\alpha_l = 1$ . Pour comprendre cet effet, on se place dans le cas théorique d'une goutte diffuse 1D représentée sur la Figure 5.22. La goutte est caractérisée par son maximum de fraction volumique ( $\alpha_l$ ) et l'épaisseur de sa diffusion  $ep$ .

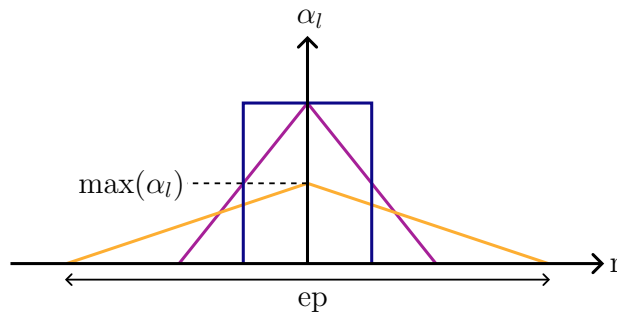


FIGURE 5.22. – Gouttes 1D diffusées

Dans ce cas l'équation de la goutte diffuse est donnée par :

$$\alpha(r) = -\frac{2\max(\alpha_l)}{ep}r + \max(\alpha_l) . \quad (5.8)$$

Cette équation permet de définir une relation entre  $S_{\text{th}} = 1/ep$  la surface théorique de la goutte et  $S_{\text{eval}} = \max(\alpha_l)/ep$ , la surface de la goutte évaluée par le gradient de la fraction volumique de liquide. Il vient :

$$\frac{S_{\text{eval}}}{S_{\text{th}}} = \max(\alpha_l) . \quad (5.9)$$

Ainsi, pour une structure liquide qui possède au moins une maille avec  $\alpha_l = 1$ ,  $S_{th} = S_{eval}$ , signifiant que la mesure de surface par le gradient donne une valeur exacte. Par contre si par exemple dans une structure liquide  $\max(\alpha_l) = 0.8$ , alors la surface de la structure liquide est sous-estimée de 20% par le gradient de fraction volumique de liquide. Ceci donne un nouveau critère de résolution de structures liquides : il est nécessaire d'avoir au moins une cellule ayant  $\alpha_l = 1$  afin d'avoir une bonne mesure de sa surface à partir de l'Equation 5.5.

Afin d'étudier ce phénomène sur toutes les structures liquides du spray coaxial, le maximum de fraction volumique de liquide  $\max(\alpha_l)$  de chaque structure liquide est tracé en fonction de son volume adimensionné  $V/\Delta_{LES-M96}^3$  sur la Figure 5.23. Pour référence les positions  $d_{30} = 4\Delta_{LES-M96}$  et  $d_{30} = 5\Delta_{LES-M96}$  sont aussi tracées. Pour les plus petites tailles ( $V/\Delta_{LES-M96}^3 < 10^1$ ) la grande majorité de structures liquides respectent :  $\max(\alpha_l) < 0.1$ . Ceci donne un aperçu de la forte diffusion des plus petites structures liquides qui peut être devinée sur la Figure 5.13. A partir de  $V/\Delta_{LES-M96}^3 \sim 10^2$ , toutes les possibilités de  $\max(\alpha_l)$  commencent à apparaître et enfin pour les plus grosses structures,  $V/\Delta_{LES-M96}^3 > 10^3$ , toutes les structures liquides ont au moins une cellule avec  $\max(\alpha_l) = 1$ .

Pour quantifier à partir de quelle échelle le gradient de fraction volumique de liquide donne une estimation précise de la surface, on compte le nombre de structures liquides ayant un  $\max(\alpha_l) \geq 0.9$ . En considérant toutes les structures liquides respectant  $d_{30} > 4\Delta_{LES-M96}$ , moins de 50% d'entre elles ont un maximum de fraction volumique supérieur au seuil contre plus de 75% en prenant  $d_{30} > 5\Delta_{LES-M96}$ . Une deuxième échelle de coupure est ainsi identifiée à  $5\Delta_{LES-M96}$  caractérisant la taille à partir de laquelle l'estimation de la surface d'une structure liquide par le gradient de fraction volumique de liquide est suffisamment précis.

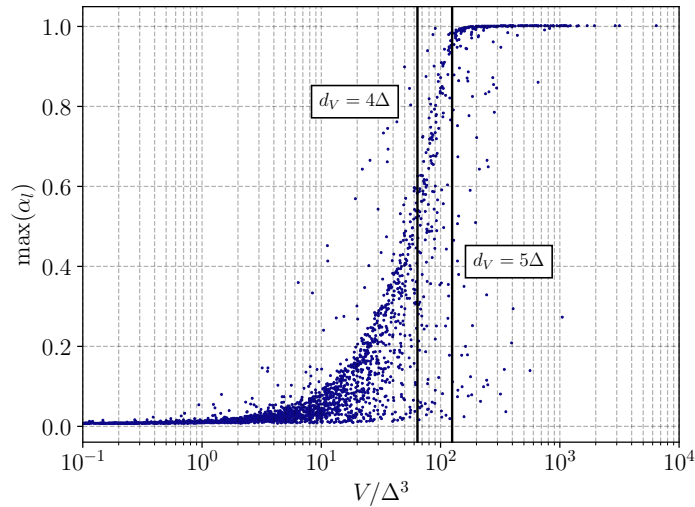


FIGURE 5.23. – Carte  $\max(\alpha_l)$  en fonction de la taille des structures liquides  $d_V$

#### 5.2.2.4. Diffusion spatiale

Il est important de noter que les échelles de coupure précédemment identifiées ne donnent qu'une estimation du volume minimal des structures liquides  $d_{30} = V^{1/3}$ . Ces structures liquides étant diffuses, elles sont en réalité diffusées sur un volume de cellules plus grand que celui de la même structure liquide résolue par un approche reconstruite. Ainsi, une structure avec un volume donné peut être diffusée de manière différente suivant la fraction volumique des cellules qui la constituent, comme schématisé sur la Figure 5.24. En ayant précédemment choisi une valeur seuil de fraction volumique de liquide on perd ainsi certaines structures n'ayant que des fractions volumiques  $\alpha_l < \alpha_{seuil}$ .

Avec  $\alpha_{seuil} = 10^{-2}$  choisie on élimine ainsi une partie des structures liquides ne contenant que des cellules avec une fraction volumique de liquide inférieure à ce seuil et on sous-estime le volume

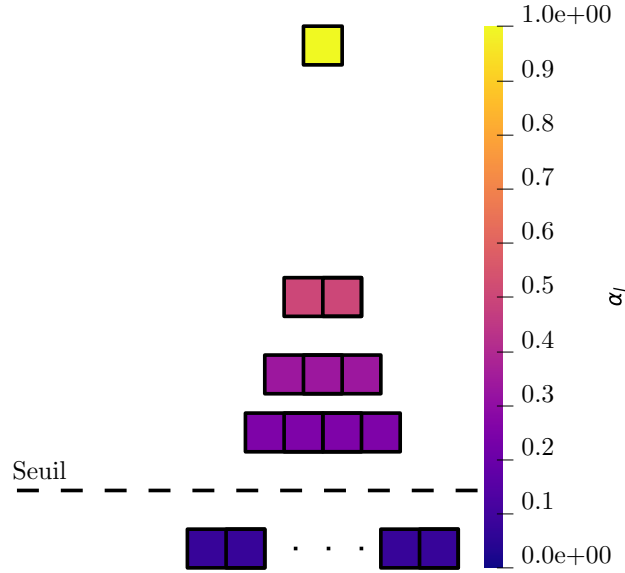


FIGURE 5.24. – Possibilités de diffusion d'une structure liquide

de structures liquides ayant un grand volume contenu dans ces cellules avec  $\alpha_{\text{seuil}} < 10^{-2}$ . En pratique, il est impossible de mesurer les structures liquides les plus diffuses, une des conséquences de l'utilisation d'une modélisation à interface diffuse étant la diffusion progressive de liquide dans tout le domaine (observable sur la Figure 5.13)<sup>4</sup>.

Une fois ces observations effectuées, on peut tout de même essayer de quantifier sur combien de mailles est diffusée une structure liquide ayant une taille  $d_{30} = V^{1/3}$ . Dans ce but, la taille des structures liquides est tracée en fonction de leur nombre de cellules sur la Figure 5.25. Les deux échelles de coupure précédemment déterminées  $d_{30} = 4\Delta_{\text{LES-M96}}$  et  $d_{30} = 5\Delta_{\text{LES-M96}}$  sont aussi tracées afin d'identifier pour une taille donnée quel est son spectre de diffusion. Tous les points sont inclus entre deux courbes limites données par :

$$V = N_{\text{cells}} \Delta_{\text{LES-M96}}^3 \alpha_l, \quad (5.10)$$

avec  $N_{\text{cells}}$  le nombre de mailles ayant une fraction volumique de liquide  $\alpha_l$ . La limite inférieure est donnée par  $\alpha_l = \alpha_{\text{seuil}} = 10^{-2}$  le seuil de détection, caractérisant une structure liquide contenant  $N_{\text{cells}}$  remplies à  $\alpha_l = 10^{-2}$ . La limite supérieure est donnée par  $\alpha_l = \alpha_{\text{seuil}} = 1$ , où les  $N_{\text{cells}}$  de la structure liquide sont remplies entièrement de liquide ; cas de figure qui n'est en pratique jamais rencontré même en interface reconstruite.

Les diffusions minimale, moyenne et maximale sont résumées dans le Tableau 5.4 pour  $d_{30} = 4\Delta_{\text{LES-M96}}$  et  $d_{30} = 5\Delta_{\text{LES-M96}}$ . Ainsi, une structure liquide ayant une taille  $d_{30} = 4\Delta_{\text{LES-M96}}$  est diffusée dans le domaine de calcul entre  $7\Delta_{\text{LES-M96}}$  et  $18\Delta_{\text{LES-M96}}$ . Une structure liquide résolue en surface  $d_{30} = 5\Delta_{\text{LES-M96}}$  peut quant à elle être diffusée entre  $9\Delta_{\text{LES-M96}}$  et  $22\Delta_{\text{LES-M96}}$ . Les structures liquides occupent donc bien tout le spectre de diffusion représenté sur la Figure 5.24 mettant en évidence que certaines structures liquides ont été filtrées par le choix de  $\alpha_{\text{seuil}}$ . Une conséquence du choix de la modélisation diphasique est qu'une structure avec un  $d_{30} = V^{1/3} = (n \times \Delta_{\text{LES-M96}})^3$  donné est en réalité diffusée sur un nombre bien plus grand de mailles et a donc une taille apparente  $d_{30}^{(\text{diff})} > d_{30}$ .

Il est important de noter que les conclusions tirées dans cette étude sont valides pour le modèle à interface diffuse présenté dans la Section 3.2.2.3. La même méthodologie pourrait être appliquée pour d'autres modèles mais donnerait assurément des résultats différents.

4. La diffusion locale peut être causée par l'atomisation. Il faut noter qu'avec un maillage identique, une solution à interface reconstruite ne donnerait pas une plus grande précision sur la taille des structures liquides plus petites que la maille.

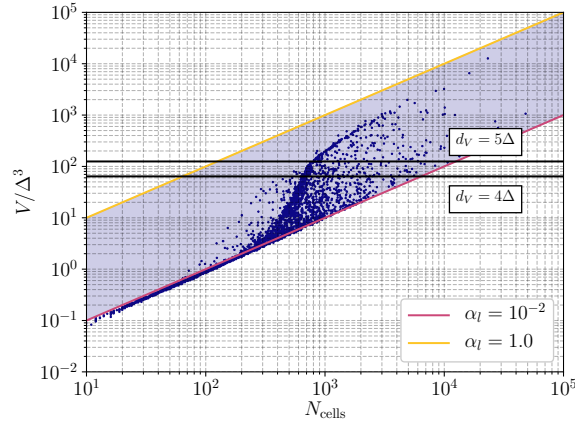


FIGURE 5.25. – Carte de la taille de structures liquides en fonction leur nombre de cellules

Diffusion		minimale	moyenne	maximale
$d_{30} = 4\Delta$	$N_{\text{cells}}$	350	650	6000
	$d_{30}^{(\text{diff})}$	$7\Delta$	$8.5\Delta$	$18\Delta$
$d_{30} = 5\Delta$	$N_{\text{cells}}$	750	750	$10^4$
	$d_{30}^{(\text{diff})}$	$9\Delta$	$9\Delta$	$22\Delta$

TABLE 5.4. – Diffusion spatiale, minimale, moyenne et maximale pour les 2 échelles de coupures précédemment identifiées

### 5.2.3. Bilan sur les approches diffuse et reconstruite

Les PDFs des deux approches étudiées dans ce chapitre sont tracées sur la Figure 5.26 en échelle logarithmique avec celles de la DNS et montrent la nette amélioration de l'approche diffuse qui permet de détecter des structures liquides beaucoup plus petites que la méthode reconstruite. La seconde méthode a aussi l'avantage de permettre de retrouver la forme log-normale attendue d'une distribution en taille des structures liquides d'un spray diphasique.

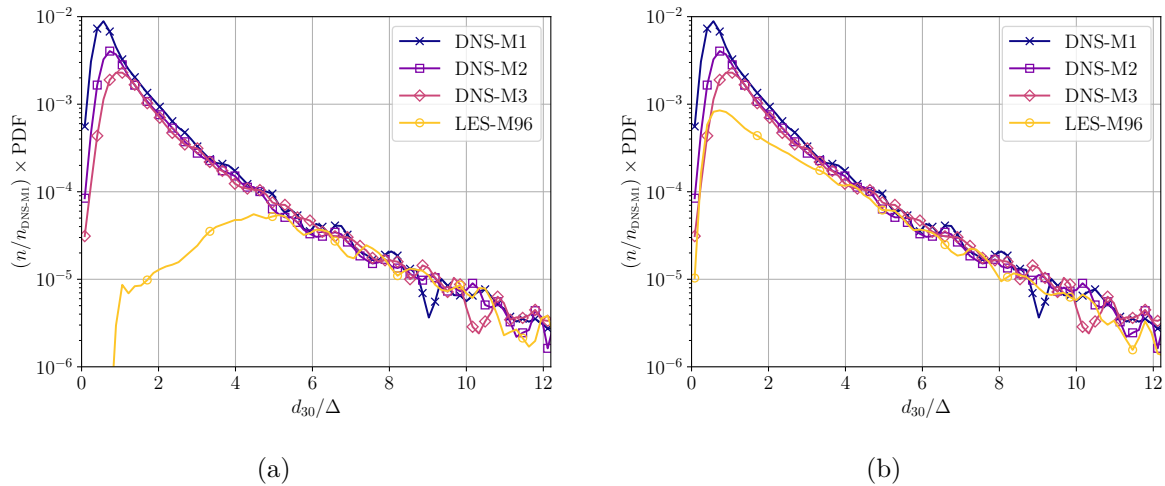


FIGURE 5.26. – PDFs des DNS de référence comparées à celle de la LES à interface diffuse avec (a) interprétation reconstruite et (b) interprétation diffuse

Les deux échelles de coupures diphasiques identifiées permettent ainsi de :

- dimensionner des maillages LES pour le diphasique, ou bien estimer a priori la taille minimale des structures liquides qui seront suffisamment résolues par le maillage ;
- positionner plus précisément la résolution dans une simulation multi-échelles ;
- donner un terme de convergence en maillage pour le modèle de densité d'aire interfaciale développé dans le [Chapitre 6](#).

Enfin, d'un point de vue qualitatif, cette analyse montre qu'une représentation d'un spray diphasique à interface diffuse ne peut pas être représenté uniquement par un seul iso-contour à  $\alpha_l = 0.5$  car il ne représente qu'une partie du jet atomisé résolu. Une représentation à plusieurs iso-contours comme celle représentée sur la [Figure 5.2](#) semble être plus pertinente.

## Bilan

Dans ce chapitre, une simulation LES des grandes échelles de l'atomisation a été présentée afin d'identifier des échelles de coupure diphasiques avec la modélisation choisie. L'intérêt se portant sur les grandes échelles diphasiques, aucun modèle de sous maille diphasique n'a été utilisé. La DNS présentée dans le [Chapitre 4](#) servant de référence, une attention particulière a été accordée afin d'en reproduire le même régime d'atomisation dans la LES.

Deux approches d'interprétation d'une interface diphasique diffuse ont été abordées, une première consistant à se ramener à une interface reconstruite et une seconde considérant toute l'épaisseur de l'interface jusqu'à une valeur seuil de fraction volumique  $\alpha_{\text{seuil}}$ . Un cas convectif de goutte a permis d'étudier la précision des deux approches avant de l'appliquer sur une configuration coaxiale. L'interprétation reconstruite a permis de montrer l'imprécision faite en considérant une structure diffuse uniquement par son iso-surface  $\alpha_l = 0.5$ . Par comparaison des PDFs LES et DNS une première échelle de coupure de volume a été identifiée à  $4\Delta$ . Dans un second temps un critère pour la résolution de la surface de structures liquides basé sur la valeur maximale de la fraction volumique de liquide a été mis en évidence. Ainsi une seconde échelle de coupure de surface à  $5\Delta$  a été identifiée.

Cette étude a permis de valider l'hypothèse implicite de l'approche multi-échelles, c'est à dire que l'approche à phases séparées permet de résoudre correctement les plus grandes échelles de l'écoulement diphasique. De plus, une échelle minimale a été identifiée. Ceci permettra de dimensionner le couplage avec une approche à phase dispersée et de construire un modèle approprié basé sur les grandeurs résolues par l'approche à interface diffuse dans le [Chapitre 6](#).

# Modélisation de l'atomisation primaire pour une approche multi-échelles

L'objectif de ce chapitre est de présenter une stratégie pour modéliser la taille des gouttes lors de leur atomisation dans le cadre de la modélisation multi-échelles d'un spray introduite dans la [Section 3.2.4](#). Pour cela on utilise une approche utilisant la densité d'aire interfaciale permettant d'estimer une taille d'atomisation de gouttes locale.

La chapitre commence par un état de l'art des modélisations de la densité d'aire interfaciale disponibles dans la littérature et de leurs applications afin de mettre en avant le besoin d'une nouvelle modélisation de la densité d'aire interfaciale adaptée aux écoulements de cette thèse. Dans un premier temps, les configurations numériques d'étude de ce chapitre sont introduites et les caractéristiques principales de l'écoulement sont présentées.

Dans un second temps la modélisation développée dans cette thèse, adaptée à l'atomisation assistée rencontrée dans les chambres de combustion des moteurs fusée à ergols liquides est présentée. Conformément à l'approche diphasique LES introduit pour la phase dense, la densité d'aire interfaciale est décomposée en une quantité résolue et de sous-maille. L'équation de transport caractérisant la composante de sous-maille est détaillée, en particulier son terme source pilotant la création de densité d'aire interfaciale ainsi que la méthodologie d'estimation du différentiel de vitesse entre le liquide et le gaz nécessaire avec une modélisation à interface diffuse à 4 équations ([Section 3.2.2.2](#)).

Enfin, le modèle est validé sur les configurations précédemment sélectionnées et une étude de sensibilité est réalisée sur les principaux paramètres du modèle.

## Sommaire

<b>6.1. Modèles de densité d'aire interfaciale</b>	<b>109</b>
6.1.1. Surface de flamme	110
6.1.2. Modélisation de Vallet	110
6.1.3. Modèle de Jay	111
6.1.4. Modèle de Lebas	111
6.1.5. Modèle de Chesnel	112
<b>6.2. Configurations numériques d'étude</b>	<b>114</b>
6.2.1. Maillages et étude de convergence	114
6.2.2. Stratégie de validation du modèle	115
<b>6.3. Modélisation de la densité d'aire interfaciale</b>	<b>116</b>
6.3.1. Fréquence d'atomisation	117
6.3.2. Weber critique	117
6.3.3. Localisation de l'atomisation	118
6.3.4. Dépendance du maillage	119
<b>6.4. Estimation du différentiel de vitesse</b>	<b>119</b>
6.4.1. Jets libres monophasiques	120
6.4.2. Décroissance de la vitesse maximale pour un jet coaxial diphasique	121
6.4.3. Vitesse de gaz non dévié	122

<b>6.5. Validation de la modélisation</b> . . . . .	<b>122</b>
6.5.1. Observations qualitatives . . . . .	122
6.5.2. Validation du cœur liquide . . . . .	123
6.5.3. Validation de l'épaisseur de couche de mélange . . . . .	123
6.5.4. Validation densité d'aire interfaciale . . . . .	126
6.5.5. Convergence en maillage et sensibilité du modèle . . . . .	127
6.5.5.1. Convergence en maillage . . . . .	127
6.5.5.2. Weber critique . . . . .	129
6.5.5.3. Fonction indicatrice d'atomisation $\lambda_{\text{atom}}$ . . . . .	130

Les résultats présentés dans le Chapitre 6 ont fait l'objet d'un article (Granger *et al.* [(soumis)]) soumis à l'IJMF (*International Journal of Multiphase Flow*), donné en annexe A.

Comme évoqué dans la Section 3.2.4.1, dans le cadre de la simulation multi-échelles d'un spray atomisant coaxial, l'effort de modélisation doit être porté sur la taille des gouttes atomisées. La modélisation actuelle consiste à générer un spray mono-disperse dont le diamètre est imposé par l'utilisateur et indépendamment des conditions locales de l'écoulement. Les limitations des corrélations existantes pour estimer cette taille moyenne ont motivé le développement de nouvelles approches pour évaluer une taille locale dynamique des gouttes lors de leur processus d'atomisation. Dans ce chapitre on s'intéresse tout particulièrement à la densité d'aire interfaciale (DAI).

La densité d'aire interfaciale  $\Sigma$  peut être écrite comme le rapport entre la surface d'interface  $\delta S$  et le volume de contrôle  $\delta V$  dans lequel elle est contenue :

$$\Sigma = \delta S / \delta V . \tag{6.1}$$

La densité d'aire interfaciale peut être interprétée comme une mesure statistique du plissement de l'interface au sein d'une maille, et de la même façon une dispersion locale de l'écoulement liquide. Les deux représentations de la Figure 6.1 caractérisent une quantité identique de densité d'aire interfaciale pour des topologies différentes, de type (a) d'une grande structure liquide soumise à déformation et (b) d'un écoulement dilué et polydispersé.

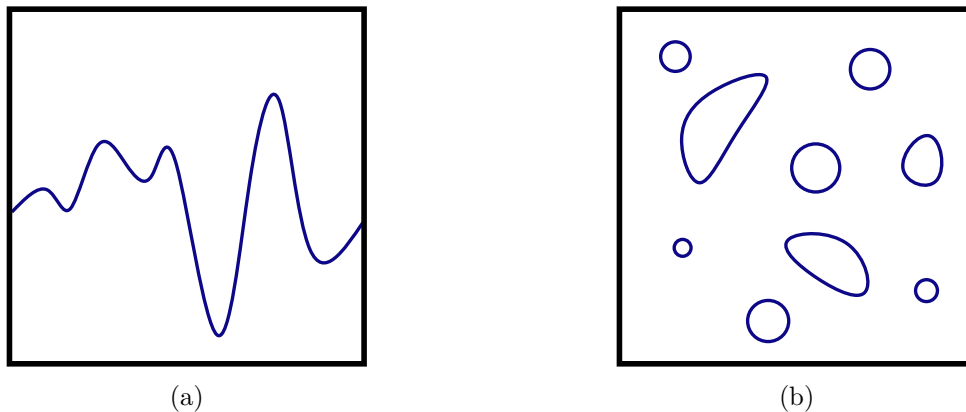


FIGURE 6.1. – Configurations possibles menant à une même densité d'aire interfaciale, (a) d'une grande structure liquide soumise à déformation et (b) d'un écoulement dilué et polydispersé

Cette grandeur peut donc être utilisée pour décrire les échelles non résolues du spray et celles de la zone dense, en passant par la zone mixte jusqu'à la phase dispersée sans hypothèse sur la forme des structures liquides atomisées. Néanmoins, en faisant l'hypothèse d'un spray mono-dispersé au sein de la maille illustré sur la Figure 3.15 (c), la densité d'aire interfaciale permet de se ramener à un diamètre de Sauter par :

$$d_{32} = \frac{6\alpha_l}{\Sigma} . \tag{6.2}$$



Il a été illustré dans la [Chapitre 4](#) que si l'interface est sous-résolue, des informations topologiques sur l'écoulement sont perdues aboutissant à un spray qui peut être significativement différent. Cet aspect a été observé sur des simulations DNS à interface reconstruite dans la [Section 4.4.2.2](#) et sur une LES à interface diffuse dans le [Chapitre 5](#), où il a été montré que le spray est résolu jusqu'à une échelle de coupure donnée par le maillage. En effet, comme il a été montré dans le [Chapitre 2](#), la taille des structures liquides atomisées est pilotée par la taille des ligaments se formant sur le cœur liquide, et une sous résolution de ceux-ci entraîne nécessairement un spray différent (a priori sous résolu lui aussi). Ce phénomène de perte d'information sur la topologie locale est illustré sur la [Figure 6.2](#) avec deux simulations DNS DyJeAT réalisées par [Averseng \[2022\]](#) sur deux maillages différents pris à des instants proches.

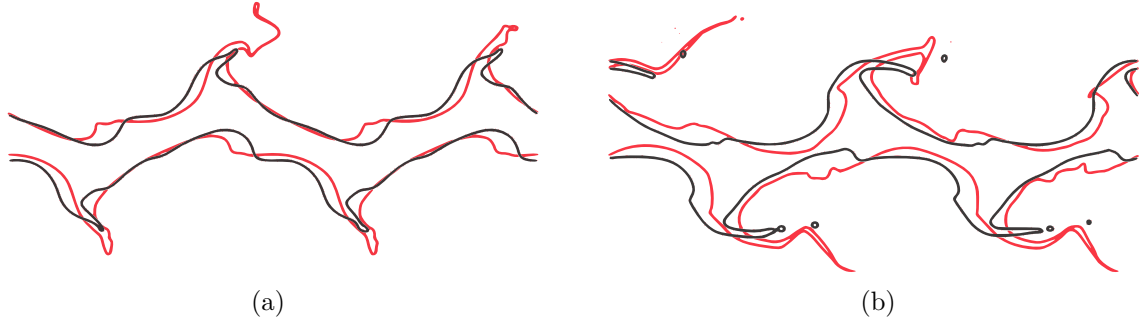


FIGURE 6.2. – Interface liquide/gaz d'une simulation DyJeAT avec  $\Delta_{\text{DNS-1}}$  (rouge) et  $\Delta_{\text{DNS-2}} = 16\Delta_{\text{DNS-1}}$  (noir) sur deux instants proches (a) et (b), [Averseng \[2022\]](#)

Sans action supplémentaire sur une simulation, le plissement local de l'interface est sous-résolu et donc la densité d'aire interfaciale est sous-estimée, entraînant une surestimation de la taille des structures locales calculée par l'[Equation 6.2](#). La solution étudiée dans ce chapitre est de modéliser une densité d'aire interfaciale de sous-maille pour compenser la perte d'information topologique liée au filtrage du maillage.

## 6.1. Modèles de densité d'aire interfaciale

Comme évoqué précédemment, l'évolution de la densité d'aire interfaciale est généralement modélisée par une quantité obéissant une équation de transport-diffusion. Cette section se concentre sur les origines de la densité d'aire interfaciale et les différentes modélisations de la densité d'aire interfaciale disponibles dans la littérature. On distingue trois approches pour traiter l'équation de transport de la densité d'aire interfaciale :

1. Faire apparaître les termes à modéliser en intégrant sur un volume de contrôle contenant une interface diphasique. La fermeture de ces termes est complexe car elle nécessite d'identifier les phénomènes physiques associés et a été étudiée par [Morel \*et al.\* \[1999\]](#) et [Delhaye \[2001\]](#).
2. Prendre une hypothèse sur la forme des structures liquides atomisées. [Iyer \*et al.\* \[2001\]](#) et [Iyer et Abraham \[2003\]](#) proposent par exemple une formulation pour des gouttes sphériques et des termes sources spécifiques liés aux phénomènes d'évaporation, de fragmentation et de coalescence. Au vu de la complexité de forme des structures atomisées sur une configuration coaxiale, observées sur la [Figure 4.3](#), notamment la formation ligamentaire complexe proche du cœur liquide, cette méthode semble inadaptée au besoin de cette thèse.
3. Sans hypothèse sur la topologie des structures liquides atomisées, utiliser une approche phénoménologique pour décrire les termes sources de création et de destruction d'interface. Cette approche est la plus répandue, et les principales modélisations existantes seront décrites dans la suite de cette section.



### 6.1.1. Surface de flamme

Dans un premier temps, on explique brièvement comment la densité d'interface a été appliquée à l'origine sur des flammes. Tout d'abord démontrée par Marble et Broadwell [1977] et Pope [1988] puis formalisée par Candel et Poinso [1989], l'équation de transport de la densité de la surface de flamme est donnée par :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial (u_i + S_L n_i) \Sigma}{\partial x_i} = \left[ (v_i v_j + w_i w_j) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] \Sigma + S_L \Sigma \frac{\partial n_i}{\partial x_i}, \quad (6.3)$$

où  $v_i$  et  $w_i$  sont les vecteurs définissant le plan de la surface de flamme,  $n_i$  le vecteur normal à l'interface et  $S_L$  est la vitesse de flamme laminaire. Duclos [1993] propose une formulation moyenne de cette équation :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\Sigma}}{\partial x_i} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \left( \frac{\nu_{\text{turb}}}{S_{C_{\text{turb}}}} \right) + S_1 + S_2 + S_3 - D, \quad (6.4)$$

avec les termes sources modélisant : l'étirement de l'interface par le champ de vitesse moyen  $S_1$ , l'étirement de l'interface par la turbulence  $S_2$ , l'influence du gradient de fraction massique  $S_3$  et la destruction de l'interface par la combustion  $D$ . Les phénomènes physiques rencontrés sur une interface de flamme sont donc proches de ceux rencontrés sur une interface diphasique. Il est donc envisageable d'étendre ces travaux aux interfaces diphasiques en conservant le même formalisme tout en adaptant les termes de création et de destruction d'interface.

### 6.1.2. Modélisation de Vallet

La première formulation pour la modélisation de la densité d'aire interfaciale diphasique a été développée par Vallet et Borghi [1999] et Vallet *et al.* [2001] dans le modèle ELSA (Euler-Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation) avec le formalisme RANS (détaillé dans la Section 3.1.2.1) conçu pour décrire l'atomisation des écoulements à nombres de Weber et de Reynolds élevés. Dans ces conditions, la turbulence est prédominante, et les forces interfaciales peuvent être négligées devant l'énergie cinétique du mélange liquide-gaz. L'équation de transport de la densité d'aire interfaciale s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i \bar{\Sigma})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_s \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + (A + a) \bar{\Sigma} - V_s \bar{\Sigma}^2, \quad (6.5)$$

avec  $\bar{\Sigma}$  la densité moyenne de surface d'interface,  $D_s$  un coefficient de diffusion,  $A$  et  $a$  les temps de production caractéristiques respectivement à grande et petite échelle, et  $V_s$  un coefficient de coalescence. Ces termes sources tiennent compte de divers phénomènes physiques tels que le mélange turbulent entre les phases liquide et gazeuse, l'influence de la contrainte de cisaillement, la fragmentation et la destruction provoquées par la coalescence ou la vaporisation.

#### Production d'interface

Le terme de production est directement proportionnel à  $\Sigma$ . Ainsi, plus il y a d'interface, plus les phénomènes à l'origine de sa création sont importants. L'influence des grandes échelles tourbillonnaires sur la création d'interface est modélisée par une loi de type gradient par :

$$A = \nu_{\text{turb}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad (6.6)$$

avec  $\nu_{\text{turb}}$  une viscosité turbulente modélisée par un modèle de turbulence, par exemple le modèle  $k - \varepsilon$  (Paragraphe 3.1.2.1) ou le modèle  $k - \omega$  (Paragraphe 3.1.2.1). L'action des petites échelles tourbillonnaires sur la création d'interface est inversement proportionnelle à un temps caractéristique turbulent  $\mathcal{T}_{\text{turb}}$  :

$$a = \frac{\alpha_2}{(36\pi)^{2/9}} \left( L_{\text{turb}} \bar{\Sigma} \right)^{2/3} \left( \frac{\rho_l}{\bar{\rho} Y_l} \right)^{4/9} \frac{1}{\mathcal{T}_{\text{turb}}} , \quad (6.7)$$

où  $\alpha_2$  est une constante de l'ordre de l'unité,  $L_{\text{turb}}$  une longueur caractéristique de la turbulence et  $Y_l$  la fraction massique de liquide.

### Destruction d'interface

L'approche de modélisation de Vallet *et al.* [2001] suppose l'existence d'un nombre de Weber local critique  $We_{\text{cr}}$  défini dans la Section 2.3.3, caractérisant l'équilibre entre les forces de coalescence et les forces de rupture, entraînant l'arrêt de la cascade d'atomisation. On peut ainsi écrire :

$$a \bar{\Sigma}_{\text{cr}} = V_s \bar{\Sigma}_{\text{cr}}^2 . \quad (6.8)$$

En utilisant l'Equation 6.2 on peut ainsi exprimer  $V_s$  :

$$V_s = \frac{a \rho_l d_{\text{cr}}}{6 \bar{\rho} Y_l} . \quad (6.9)$$

Une hypothèse intéressante formulée dans le modèle de Vallet *et al.* [2001] est qu'il doit exister un diamètre de goutte liquide limite caractérisant cet équilibre, vérifié expérimentalement par Pilch et Erdman [1987] et détaillée dans la Section 2.3.3. La définition de la taille des gouttes critique  $d_{\text{cr}}$  formulée par l'Equation 2.36 dépend d'un nombre de Weber critique que Vallet *et al.* [2001] proposent de prendre égal à 1.

On peut noter que le terme de destruction d'interface est proportionnel à  $\Sigma^2$  qui peut être interprété, par analogie aux équations de Boltzmann sur des particules, comme une interaction de l'interface avec elle même.

#### 6.1.3. Modèle de Jay

En s'appuyant sur le travail de Vallet *et al.* [2001], Jay *et al.* [2006] ont réalisé une simulation RANS d'une injection cryogénique réactive en utilisant une approche multi-fluides ALE (Arbitraire Eulérienne-Lagrangienne) couplée à la fois avec une équation de densité d'aire interfaciale et de densité de flamme. L'équation de transport de la densité d'aire interfaciale est similaire à celle de Vallet *et al.* [2001] avec des termes sources différents :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i \bar{\Sigma})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_s \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + \dot{\bar{\Sigma}}_{\text{instab}} + \dot{\bar{\Sigma}}_{\text{rup}} + \dot{\bar{\Sigma}}_{\text{evap}} , \quad (6.10)$$

où  $\dot{\bar{\Sigma}}_{\text{instab}}$  contient la modélisation des instabilités interfaciales près de l'injecteur,  $\dot{\bar{\Sigma}}_{\text{rup}}$  la rupture par analogie de Taylor de O'Rourke et Amsden [1987] et  $\dot{\bar{\Sigma}}_{\text{evap}}$  l'évaporation. Les résultats de simulations ont montré une bonne concordance avec les mesures expérimentales de densité d'aire interfaciale et du flux de chaleur moyens. Les termes sources de ce modèle ne sont pas explicités ici, le lecteur peut se référer à Jay *et al.* [2006] pour en avoir tous les détails.

#### 6.1.4. Modèle de Lebas

De manière similaire, Lebas *et al.* [2009] ont utilisé le modèle ELSA pour simuler la région dense d'un jet Diesel, en séparant les régions "denses" des régions "diluées" en fonction de la valeur locale de la fraction massique de liquide. L'équation de transport de la densité d'aire interfaciale est adaptée en conséquence et s'écrit sous forme massique :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\Omega}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\Omega}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{\Omega} (\tilde{u}_i - \tilde{u}_i|_{\Omega})) + Y_l (\bar{\rho} \dot{\tilde{\Omega}}_{\text{dens}}) + (1 - Y_l) (\bar{\rho} \dot{\tilde{\Omega}}_{\text{disp}}) + \bar{\rho} \dot{\tilde{\Omega}}_{\text{evap}} , \quad (6.11)$$

avec  $\Omega$  la densité d'aire interfaciale massique et  $\tilde{u}_i|_{\Omega}$  la vitesse de l'interface qui est inconnue a priori. Vallet *et al.* [2001], Lebas *et al.* [2005] et Lebas *et al.* [2009] proposent de modéliser le premier membre de droite caractérisant le glissement de l'interface par de la diffusion turbulente. Ensuite, le terme source de la zone dense  $\dot{\tilde{\Omega}}_{\text{dens}}$  est décomposé en deux termes de production liés à l'initialisation de la densité d'aire interfaciale  $\dot{\tilde{\Omega}}_{\text{init}}$  et à la turbulence  $\dot{\tilde{\Omega}}_{\text{turb}}$ . De manière similaire le terme source de la phase dispersée  $\dot{\tilde{\Omega}}_{\text{disp}}$  est décomposé en deux termes pour séparer les contributions des phénomènes de collision et de coalescence  $\dot{\tilde{\Omega}}_{\text{coll/coal}}$  des phénomènes de rupture/fragmentation de gouttes  $\dot{\tilde{\Omega}}_{\text{frag}}$ . Le détail de ces termes n'est pas donné dans cette thèse (le lecteur pourra se référer à Lebas *et al.* [2009]), hormis celui de turbulence. Ce terme est particulier car il modélise simultanément la production ainsi que la destruction d'interface et sera repris par la suite. En développant le terme source on obtient un terme de production proportionnel à  $\Omega$  et un terme de destruction proportionnel à  $\Omega^2$  de l'interface par la turbulence et prend la forme :

$$\dot{\tilde{\Omega}}_{\text{turb}} = \frac{\tilde{\Omega}}{\mathcal{T}_{\text{turb}}} \left( 1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_{\text{cr}}} \right) , \quad (6.12)$$

avec  $\tilde{\Omega}_{\text{cr}}$ , la densité d'aire interfaciale critique caractérisant la valeur d'équilibre de DAI. Cette approche a été utilisée avec un modèle d'écoulement monophasique, dans lequel le fluide est composé de deux espèces, une liquide et une gazeuse, avec une densité variable. Des comparaisons ont été faites avec le modèle de Beau *et al.* [2006] ainsi qu'avec une simulation DNS du code CORIA ARCHER.

De plus, Duret *et al.* [2013] ont réalisé des simulations DNS Level-Set/VoF pour mesurer le nombre de Weber critique dans un domaine cubique tridimensionnel avec une Turbulence Homogène Isotrope (THI). Les auteurs ont réalisé une analyse statistique du Weber critique pour vérifier la formulation du modèle ELSA pour différentes fractions volumiques de liquide, résolutions de maillage et valeurs de tensions superficielles. Cette étude a suggéré l'utilisation de l'énergie cinétique liquide ou de l'énergie cinétique moyennée dans la définition du Weber critique.

### 6.1.5. Modèle de Chesnel

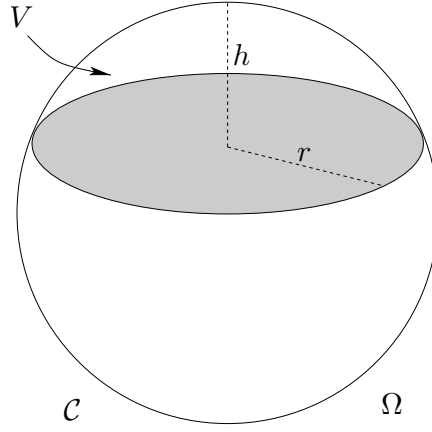
Chesnel *et al.* [2011] ont tenté une extension de l'approche de densité d'aire interfaciale de Vallet *et al.* [2001] et Lebas *et al.* [2009] à la simulation LES d'un jet Diesel. Les auteurs introduisent une décomposition de la densité d'aire interfaciale  $\Sigma$  en une partie minimale résolue  $\Sigma_{\text{min}}$  et une partie sous-maille  $\Sigma'$  par analogie à la turbulence<sup>1</sup> :

$$\Sigma = \Sigma_{\text{min}} + \Sigma' . \quad (6.13)$$

La densité d'aire interfaciale minimale résolue  $\Sigma_{\text{min}}$  est reconstruite à partir de considérations réalisées sur des volumes sphériques, telles que représentée sur la Figure 6.3. L'utilisation d'un volume sphérique permet d'avoir une relation unique pour une cellule donnée par invariance par rotation.

En considérant que la sphère  $\mathcal{C}$  est remplie à une fraction volumique de liquide  $\alpha_l$ , on peut montrer une relation entre les paramètres géométriques de la sphère et la surface d'interface minimale. Chesnel [2011] approxime cette relation et donne une formulation dépendante uniquement de la fraction volumique de liquide dans la sphère :

1. On peut noter que l'analogie n'est pas complète puisque l'on décompose la DAI en une partie résolue **mini-male** et une partie sous-maille


 FIGURE 6.3. – Mesure de  $\Sigma_{\min}$  sur une cellule sphérique

$$\Sigma_{\min} = \frac{2.4}{\Delta_{\text{LES}}} \sqrt{\alpha_l(1 - \alpha_l)} . \quad (6.14)$$

Chesnel [2011] met en évidence que la déviation de la valeur fournie par la formulation de l'Equation 6.14 qui peut atteindre plus de 50% de la valeur réelle de  $\Sigma_{\min}$  sur une maille sphérique théorique. De plus, il est important de noter que cette formulation a été développée dans le cadre d'une modélisation à interface reconstruite et n'est pas valable pour une interface diffuse. En effet, l'application de cette formulation sur une interface diffuse entraînerait une surestimation de la densité d'aire interfaciale en évaluant cette quantité dans chaque cellule de l'épaisseur de l'interface.

Ensuite, la partie sous-maille de la densité d'aire interfaciale est transportée par :

$$\frac{\partial \Sigma'}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_i \Sigma')}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_s \frac{\partial \Sigma'}{\partial x_i} \right) + \dot{\Sigma}_{\text{créa}} , \quad (6.15)$$

avec  $\dot{\Sigma}_{\text{créa}}$  le terme source de création d'interface contenant toute la modélisation. L'expression de ce terme est choisi similaire à l'Equation 6.12 :

$$\dot{\Sigma}_{\text{créa}} = \frac{\Sigma}{\mathcal{T}_{\text{turb}}} \left( 1 - \frac{\Sigma}{\Sigma_{\text{cr}}} \right) , \quad (6.16)$$

où  $\tau_{\text{turb}}$  est un temps de relaxation de  $\Sigma$  vers sa valeur d'équilibre  $\Sigma_{\text{cr}}$ . La densité d'aire interfaciale critique est elle aussi décomposée en une partie résolue et une partie sous-maille :

$$\Sigma_{\text{cr}} = \Sigma_{\min} + \Sigma'_{\text{cr}} , \quad (6.17)$$

avec  $\Sigma'_{\text{cr}}$  la densité d'aire interfaciale critique de sous-maille. Les auteurs proposent que lorsque l'interface est suffisamment résolue, la densité d'aire interfaciale doit tendre vers la valeur de densité d'aire interfaciale minimale résolue par le maillage LES. Ainsi, la formulation de  $\Sigma_{\text{cr}}$  est définie par un Weber critique comme suit :

$$\text{We}_{\text{cr}} = \alpha_l(1 - \alpha_l) \frac{\tilde{\rho} \tilde{k}}{\sigma \Sigma_{\text{cr}}} , \quad (6.18)$$

où  $\tilde{k}$  est l'énergie cinétique de sous-maille filtrée. En conséquence, la densité d'aire interfaciale critique prend la forme suivante :

$$\Sigma_{\text{cr}} = \Sigma_{\min} + \alpha_l(1 - \alpha_l) \frac{\tilde{\rho} \tilde{k}}{\sigma \text{We}_{\text{cr}}} . \quad (6.19)$$

La valeur pratique du nombre de Weber critique est fixée à 1, comme par Vallet *et al.* [2001]. Ensuite, le temps caractéristique  $\mathcal{T}_{\text{turb}}$  est évalué par une approximation de type Boussinesq

(Paragraphe 3.1.2) :

$$\frac{1}{\mathcal{T}_{\text{turb}}} = |\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}, \quad (6.20)$$

avec  $\bar{S}$  le tenseur des efforts résolus filtré défini dans l'Equation 3.33.

Le modèle de densité d'aire interfaciale ainsi formulé pour le formalisme LES a donné des résultats prometteurs sur les jets Diesel avec atomisation mécanique.

Dans la configuration particulière de l'atomisation coaxiale assistée, les hypothèses formulées dans les travaux précédents ne sont pas adaptées à la nature de l'écoulement étudié dans cette thèse. En particulier, dans l'atomisation assistée, la déstabilisation et la fragmentation du liquide proviennent du cisaillement de l'interface créé par le différentiel de vitesse entre le liquide et le gaz, plutôt que de l'effet de la turbulence seul. Ainsi, la définition du nombre de Weber critique proposé par Chesnel *et al.* [2011] n'est pas adaptée et doit dépendre du cisaillement local entre la phase liquide et la phase gazeuse. La suite du chapitre propose un modèle qui vise à prendre en compte ce phénomène physique particulier. Le modèle est conçu pour fonctionner avec le solveur diphasique phase dense CHARME, présenté dans la Section 3.2.2.3.

Le modèle est basé sur la même équation de transport-diffusion que Chesnel *et al.* [2011], mais avec un terme source redéfini. La formulation proposée pour le nombre de Weber critique repose fortement sur l'écart de vitesse entre le gaz et le liquide. À cette fin, une méthode innovante pour estimer cet écart de vitesse est présentée dans la Section 6.4. Le modèle adapté est ensuite appliqué à une simulation LES d'un injecteur coaxial, et les résultats sont comparés aux données de référence DNS (Section 4.4.2.3) pour validation.

## 6.2. Configurations numériques d'étude

L'étude se focalise sur la même configuration présentée dans la Section 4.2 pour la simulation DNS et dans le Chapitre 5 sur le maillage LES-M96. On s'intéresse ici à la zone où il y a production d'interface liée à l'atomisation texturale (Section 2.1.3), et dans ce contexte, la Figure 4.14 a mis en évidence que cette zone se situe entre  $1 D_1$  et  $5 D_1$  en aval de l'injecteur, on peut donc réduire le coût de calcul en réduisant la longueur du domaine à  $11 D_1$ . La largeur du domaine est identique à la DNS à environ  $6 D_1$ . De manière identique au Chapitre 5 seul le solveur phases séparées CHARME, dont les paramètres numériques sont donnés dans le Tableau 5.1, est utilisé dans la suite du chapitre. L'utilisation du modèle avec le solveur phase séparée SPIREE sera effectué dans le Chapitre 7.

### 6.2.1. Maillages et étude de convergence

La précision de la solution de la phase dense peut avoir un impact significatif sur le comportement du modèle, car elle définit implicitement une échelle de coupure diphasique séparant les échelles résolues des échelles de sous-maille : le modèle doit être capable de "détecter" l'échelle de résolution de la phase dense et de s'adapter pour modéliser les échelles non résolues. Pour cette raison, l'étude réalisée dans ce chapitre évalue le comportement du modèle sur trois maillages LES avec des raffinements différents (LES-M5, LES-M9 et LES-M20). Le nombre de cellules de chaque maillage étudié est indiqué dans le Tableau 6.1. Le résultat recherché est un modèle de DAI capable de modéliser les échelles de sous-maille indépendamment du maillage utilisé.

	LES-M5	LES-M9	LES-M20
Nombre de cellules	5.2M	9M	20M

TABLE 6.1. – Maillages LES pour la validation du modèle de densité d'aire interfaciale

Pour comparer la taille des cellules entre les différents cas, la taille moyenne transverse des cellules dans la zone d'atomisation pour les trois LES et la DNS-M1 est tracée dans la [Figure 6.4](#). La taille des cellules est calculée en utilisant le diamètre hydraulique  $\Delta$ , donné dans l'[Equation 5.2](#), qui fournit des résultats consistants quel que soit le type de cellule utilisé. La [Figure 6.4](#) donne la taille des cellules des différents maillages dans la zone d'atomisation identifiée sur la DNS. Le maillage LES-M20 montre des diamètres de cellules proches de celui de la DNS ( $\Delta \sim 0.22 \delta_{lip}$ ) dans la zone d'atomisation.

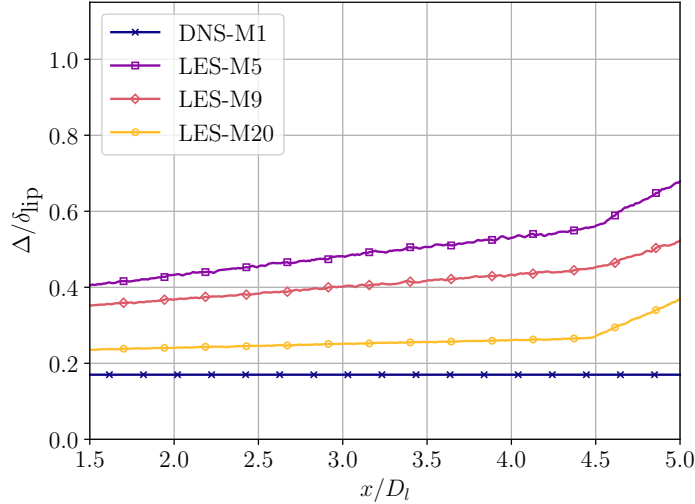


FIGURE 6.4. – Taille de cellule moyenne dans la zone d'atomisation

Le maillage LES-M9 sera utilisé pour valider le modèle de DAI dans la [Section 6.5](#), tandis que les autres maillages seront utilisés pour tester la convergence en maillage du modèle dans la [Section 6.5.5.1](#).

Un champ instantané de la simulation LES-M9 est présenté sur la [Figure 6.5](#) où le processus d'atomisation peut être observé avec le cœur liquide, quelques ligaments attachés et des structures liquides atomisées. Il permet aussi de vérifier que le phénomène d'atomisation se déroule bien entièrement dans le domaine malgré une réduction de sa longueur.

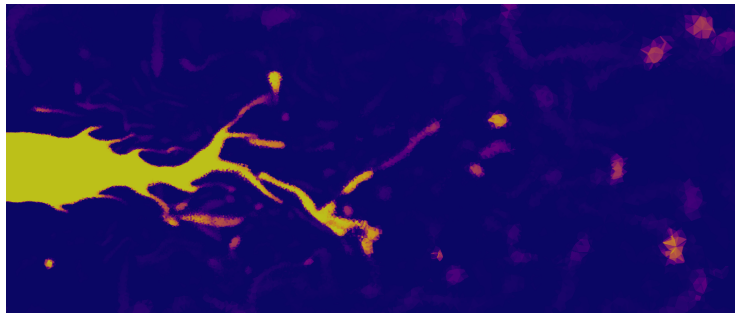


FIGURE 6.5. – Champ instantané de fraction volumique de cellule sur le maillage LES-M9

### 6.2.2. Stratégie de validation du modèle

La validation du modèle de DAI sera effectuée par comparaison aux données DNS présentées dans la [Section 4.4.2.3](#). Le raffinement du maillage à l'intérieur de l'injecteur pour les cas LES définis dans le [Tableau 6.1](#) est identique à celui du maillage LES-M96 présenté dans la [Section 5.1.1](#) afin de garantir les mêmes conditions d'atomisation dans la chambre<sup>2</sup>. Aucune turbulence n'a été

2. Malgré un dé-raffinement dans la chambre important en comparaison au cas LES-M96 pour limiter le coût de calcul.

ajoutée aux conditions limites d'injection pour la simulation DNS, ni dans les simulations LES. Pour le confirmer, la Figure 6.6 présente les profils de vitesse du gaz et du liquide à l'injection en  $x = 0 D_l$ . Comme on peut l'observer, les profils LES et DNS sont très proches, avec seulement une légère différence sur le rayon externe de l'injecteur de gaz. Cet écart n'est pas significatif car le processus d'atomisation se produit sur les plus faibles valeurs de rayon, où les profils de vitesse du gaz et du liquide LES se superposent à ceux de la DNS.

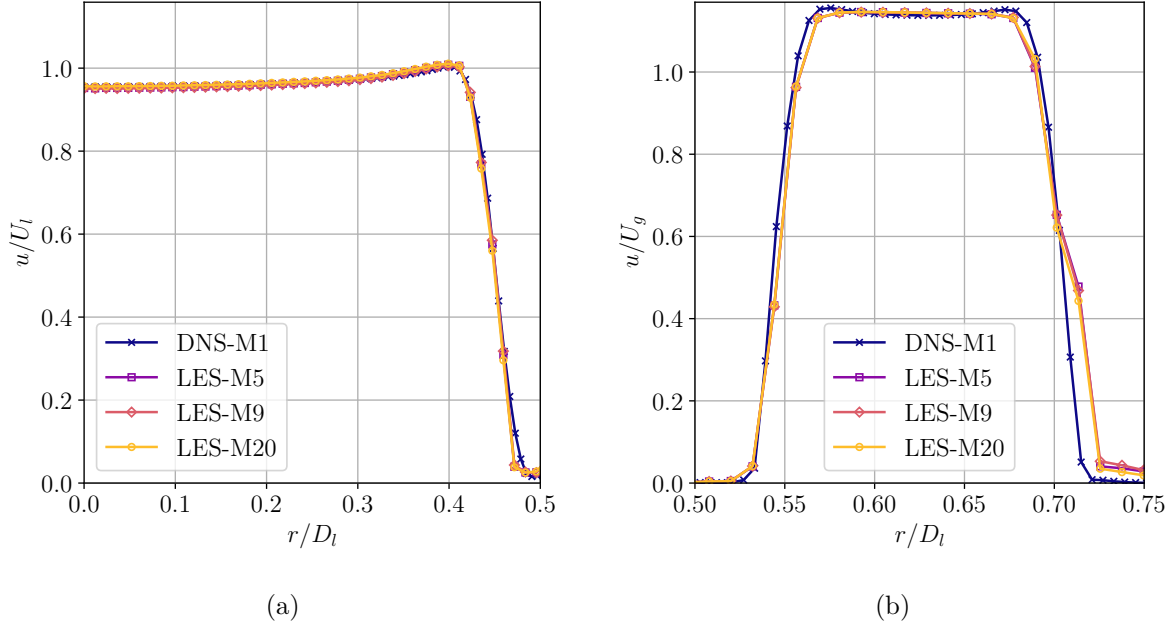


FIGURE 6.6. – Vitesse d'injection du liquide (a) et du gaz (b) à la position  $x = 0$

### 6.3. Modélisation de la densité d'aire interfaciale

Dans cette section, un nouveau modèle de DAI adapté à la LES de l'atomisation assistée est présenté, inspiré du travail de Chesnel *et al.* [2011]. Le modèle décompose la densité d'aire interfaciale  $\Sigma$  en deux parties, à savoir une partie résolue  $[\cdot]_{\text{res}}$  et une partie de sous-maille  $[\cdot]'$ , similaire à la décomposition utilisée pour la modélisation de la turbulence :

$$\Sigma = \Sigma_{\text{res}} + \Sigma' . \quad (6.21)$$

On propose une définition de la densité d'aire interfaciale résolue différente de la formulation de l'Equation 6.14, adaptée à une modélisation diphasique à interface diffuse, basée sur le gradient de la fraction volumique de liquide :

$$\Sigma_{\text{res}} = |\nabla \alpha_l| . \quad (6.22)$$

La formulation proposée diffère légèrement de celle de Chesnel [2011], en effet, on ne parle plus de densité d'aire interfaciale résolue minimale mais de densité d'aire interfaciale résolue. Cette définition permet d'estimer la partie résolue de la DAI à condition que la structure liquide soit bien résolue. L'aspect de résolution d'une structure liquide a été étudié en détail dans le Chapitre 5, et on désigne ici une structure liquide résolue par une structure dont on résout la surface globale (au sens donné dans la Section 5.2.2.3) et comportant donc au moins une cellule avec  $\alpha_l = 1$ . Cette hypothèse est valide dans la zone d'activation du modèle car elle se situe près du cœur liquide comportant de nombreuses cellules proches de l'interface avec une fraction volumique de liquide égale à 1. On peut noter que cette définition ne dépend pas de la forme de la cellule et fonctionne aussi bien pour une modélisation à interface reconstruite que pour une modélisation à interface diffuse.



La partie sous-maille de la DAI obéit quant à elle à une équation d'advection-diffusion identique à l'Equation 6.15. Cette étude ne se focalise pas sur le terme de diffusion car il a une influence très limitée en atomisation assistée, l'écoulement étant piloté par le cisaillement du gaz que la phase liquide. La modélisation du terme source  $\dot{\Sigma}_{\text{créa}}$  est néanmoins différente de celle de l'atomisation mécanique :

$$\dot{\Sigma}_{\text{créa}} = f_{\text{cis}} \times \lambda_{\text{atom}} \times \Sigma \times \max \left\{ \left( 1 - \frac{\Sigma}{\Sigma_{\text{cr}}} \right), 0 \right\} \times \Psi . \quad (6.23)$$

Le terme source de production  $\dot{\Sigma}_{\text{créa}}$  repose sur plusieurs termes dont : la fréquence caractéristique de création de la DAI  $f_{\text{cis}}$ , un terme de localisation de l'atomisation  $\lambda_{\text{atom}}$ , un terme de convergence du maillage  $\Psi$ , et la valeur critique de la densité d'aire interfaciale  $\Sigma_{\text{cr}}$ . La définition détaillée de ces termes sera donnée dans les sections suivantes.

### 6.3.1. Fréquence d'atomisation

Le temps caractéristique de la densité d'aire interfaciale est un paramètre clé, écrit sous forme fréquentielle  $f_{\text{cis}}$ , utilisé dans l'équation Equation 6.23 pour décrire la vitesse à laquelle  $\Sigma$  atteint sa valeur d'équilibre  $\Sigma_{\text{cr}}$ . Contrairement au temps caractéristique utilisé pour l'atomisation des jets Diesel dans l'Equation 6.20, lié à la turbulence au travers du tenseur des déformations  $S_{ij}$ , le temps caractéristique de l'atomisation assistée dépend de l'écart de vitesse entre le gaz et le liquide  $|u_g - u_l|$ , car cet écart est à l'origine des instabilités surfaciques du liquide.

Sa formulation dépend de la fréquence caractéristique (Equation 2.32) de rupture de gouttes proposée par Pilch et Erdman [1987] :

$$f^* = \frac{|u_g - u_l|}{d_{\text{min}}} \left( \frac{\rho}{\rho_l} \right)^{0.5} , \quad (6.24)$$

avec  $d_{\text{min}}$  un diamètre caractéristique dont l'expression est détaillée ci-dessous,  $\rho$  la masse volumique locale,  $\rho_l$  la masse volumique du liquide et  $|u_g - u_l|$  l'écart de vitesse entre le liquide et le gaz qui nécessite une fermeture (Section 6.4) pour la modélisation diphasique à 4 équations définie dans la Section 3.2.2.3. Bien que l'Equation 6.24 fournisse une fréquence caractéristique de rupture de goutte, elle ne représente pas directement l'échelle de temps de création d'interface et nécessite une analyse détaillée des phénomènes menant à la rupture.

Comme l'ont noté Hoarau *et al.* [(soumis)], la création maximale de densité d'aire interfaciale se situe dans des régions où il y a des ligaments à la fois attachés au cœur liquide et détachés de celui-ci. Cela suggère que le temps caractéristique de la densité d'aire interfaciale est lié au déclenchement de la rupture (moment de séparation d'un ligament du cœur liquide) décrit par Pilch et Erdman [1987] (Equation 2.33) que l'on réécrit sous forme fréquentielle :

$$f^*/f_{\text{cis}} = 1.9(\text{We}_{\text{local}} - 12)^{-0.25}(1 + 2.2 \text{Oh}^{1.6}) , \quad (6.25)$$

avec  $\text{We}_{\text{local}}$  le nombre de Weber local, qui dépend d'une longueur caractéristique définie avec la valeur locale de  $\Sigma$  comme :

$$\text{We}_{\text{local}} = \frac{\rho(u_g - u_l)^2}{\sigma \Sigma} , \quad (6.26)$$

Pour la configuration étudiée, Marmottant et Villermaux [2004b] prédisent un diamètre moyen des gouttes atomisées de  $0.55 \delta_{\text{lip}}$ , ce qui donne  $\text{Oh} \sim 0.01$ . Un petit nombre d'Ohnesorge indique que les forces de tension superficielle et les forces inertielles sont prédominantes par rapport à la viscosité, indiquant la présence de structures liquides faiblement visqueuses.

### 6.3.2. Weber critique

La valeur critique de DAI  $\Sigma_{\text{cr}}$  représente la quantité maximale de DAI pouvant être atteinte dans une configuration donnée. De manière similaire à la DAI  $\Sigma$ ,  $\Sigma_{\text{cr}}$  peut également être décomposé en



une partie résolue  $[\cdot]_{\text{res}}$  et une partie fluctuante  $[\cdot]'$ , suivant la même méthode que l'Equation 6.22 :

$$\Sigma_{\text{cr}} = \Sigma_{\text{res}} + \Sigma'_{\text{cr}} , \quad (6.27)$$

avec  $\Sigma'_{\text{cr}}$  la partie sous-maille de la valeur critique de DAI.  $\Sigma'_{\text{cr}}$  est quelque part le résultat de toute la physique de la création et de destruction de DAI, soit les phénomènes d'atomisation et de coalescence et dépend d'un nombre de Weber critique  $We_{\text{cr}}$ . Pour avoir une estimation de ce dernier, l'Equation 2.31 de [Pilch et Erdman \[1987\]](#) donne  $We_{\text{cr}} \sim 12$  pour la rupture d'une goutte isolée dans un écoulement laminaire à partir du nombre d'Ohnesorge déterminé précédemment. Le processus d'atomisation créant des structures liquides de formes variées, y compris des ligaments allongés qui sont nécessairement moins stables que les gouttelettes, le nombre de Weber critique attendu doit être inférieur à 12 mais supérieur à  $We_{\text{cr}} = 1.18$  donné par [Hinze \[1955\]](#) pour les gouttelettes dans un écoulement dominé par la turbulence<sup>3</sup>. En utilisant un  $We_{\text{cr}}$  dans cette plage, la définition du diamètre maximal stable des gouttelettes atomisées par [Pilch et Erdman \[1987\]](#) est étendue aux structures liquides de formes générales et est identifiée comme  $1/\Sigma'_{\text{cr}}$  dans cet article :

$$\Sigma'_{\text{cr}} = \frac{\rho \Delta V^2}{\sigma We_{\text{cr}}} \times \left(1 - \frac{u_{\text{frag}}}{\Delta V}\right)^2 , \quad (6.28)$$

avec  $u_{\text{frag}}$  la vitesse des structures liquides qui viennent de se détacher du cœur liquide, que l'on appelle par la suite la vitesse de fragmentation et  $\Delta V$  le différentiel de vitesse entre le gaz et le liquide. L'Equation 6.28 souligne que la modélisation de la vitesse de fragmentation influence directement la création d'interface. Une vitesse de fragmentation plus lente engendre une plus grande aire d'interface car la structure peut être déformée ou fragmentée par le gaz, tandis qu'une vitesse de fragmentation plus élevée entraîne une création de DAI plus faible car les structures liquides sont plus proches de l'équilibre. Dans ce manuscrit, on suppose que les structures liquides sont atomisées à une vitesse égale à la vitesse locale du liquide. En injectant  $u_{\text{frag}} = u_l$  dans l'Equation 6.28, la valeur critique de DAI de sous-maille devient :

$$\Sigma'_{\text{cr}} = \frac{\rho (\max\{u_g - 2u_l, 0\})^2}{\sigma We_{\text{cr}}} . \quad (6.29)$$

L'Equation 6.29 diffère des formulations traditionnelles du nombre de Weber qui dépendent de  $\Delta V$ . Une interprétation de cette différence est qu'en choisissant la vitesse initiale de la goutte comme la vitesse locale, le processus d'atomisation se produit uniquement lorsque  $u_g > 2u_l$ . Sinon, aucune fragmentation de structure liquide ne se produit car l'écart de vitesse n'est pas suffisant pour la rompre. Le diamètre local de goutte est ensuite défini en résolvant l'Equation 6.29 pour la longueur caractéristique :

$$d_{\text{min}} = \frac{1}{\Sigma'_{\text{cr}}} = We_{\text{cr}} \frac{\sigma}{\rho |\max\{u_g - 2u_l, 0\}|^2} , \quad (6.30)$$

où  $d_{\text{min}}$  est le diamètre qui décrit la taille des plus petites structures liquides atomisées.

### 6.3.3. Localisation de l'atomisation

Supposer que le processus d'atomisation assistée est uniquement piloté par l'écart de vitesse entre le liquide et le gaz n'est pas suffisant pour modéliser précisément la création de DAI. Comme décrit par [Hoarau et al. \[\(soumis\)\]](#), le processus d'atomisation ne se produit pas immédiatement après que le liquide sorte de l'injecteur, malgré un différentiel de vitesse maximal entre le gaz et le liquide. En réalité, il faut du temps aux instabilités de Rayleigh et de Plateau pour se développer et finalement créer une interface à travers des ligaments. Hors, sans terme supplémentaire, le modèle prédirait la création de DAI immédiatement après l'injection. Par conséquent  $\lambda_{\text{atom}}$  est

3. La valeur déterminée pour la configuration étudiée dans ce chapitre est fournie dans [Section 6.5.4](#).

ajouté à l'Equation 6.23 pour retarder la création de DAI dans la chambre, et est défini comme une fonction indicatrice ( $\mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ ) :

$$\lambda_{\text{atom}}(X) = \frac{1}{1 + \exp(-b_\lambda(X - a_\lambda))} . \quad (6.31)$$

$b_\lambda$  caractérise la pente de la fonction  $\lambda_{\text{atom}}$  et  $a_\lambda$  est la position pour laquelle  $\lambda_{\text{atom}} = 0.5$ . L'objectif de la fonction  $\lambda_{\text{atom}}$  est d'être égale à 1 en aval de la zone d'atomisation et à 0 en amont. La valeur de  $a_\lambda$  est donc déterminée en imposant une valeur proche de 1 (0.9 dans cette section) à la position du début de l'atomisation  $X_{\text{atom}}$ . Une estimation de la longueur moyenne de rupture  $X_{\text{atom}}$  a été obtenue à partir des résultats de la DNS et a été identifiée dans la Section 6.5.2. Cette longueur est donnée par la position de l'iso-contour moyen de la fraction volumique de liquide  $\alpha_l = 0.5$  correspondant à l'emplacement de la production maximale de DAI selon Hoarau *et al.* [(soumis)]. Cela conduit à un coefficient  $a_\lambda = 1.70$ , qui sera utilisé dans les sections suivantes de cette étude avec  $b_\lambda$  fixé à 5. Une analyse de sensibilité de ces paramètres est réalisée dans la Section 6.5.5.3.

### 6.3.4. Dépendance du maillage

Une distinction notable par rapport à l'approche de modélisation de Chesnel *et al.* [2011] est que la DAI critique de sous-maille  $\Sigma'_{\text{cr}}$  ne dépend pas des quantités de sous-maille modélisées, mais repose sur les quantités du filtrées (la vitesse). Cela implique que : i) la résolution du modèle de phase dense a une influence directe sur ce terme, et ii) le modèle ne doit s'activer que lorsque l'on détecte une sous-résolution locale de la solution dense en deux phases. En d'autres termes, le couplage entre la LES et le modèle de DAI devrait reconstruire les échelles manquantes pour une large gamme de tailles de maillage LES, mais aussi dégénérer vers une DNS (sans modèle de sous-maille) lorsque le raffinement est suffisant.

Afin de garantir une indépendance du terme source par rapport au maillage, un terme supplémentaire  $\Psi$  a été inclus dans Equation 6.23. La formulation de  $\Psi$  nécessite une estimation des plus petites structures liquides, qui ont été définies par  $d_{\text{min}}$  dans l'Equation 6.30. En effet, le modèle doit alors tenir compte de quelles sont les plus petites échelles résolues par la LES et les comparer aux plus petites échelles de structures liquides possibles dans l'écoulement.

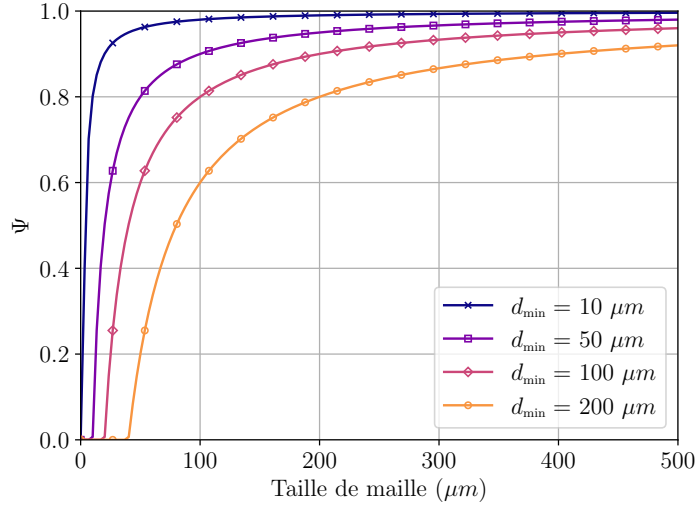
La Section 4.4.2.2 a montré que la DNS à interface reconstruite pouvait résoudre de manière précise les plus petites structures jusqu'à  $2\Delta$ . Le Chapitre 5 a quant à lui permis d'identifier une échelle de coupure se basant sur l'aire interfaciale des structures liquides diffuses, estimée par l'intégrale du gradient de la fraction volumique de liquide, à  $5\Delta$ . Cette dernière correspond à la définition de la densité d'aire interfaciale résolue définie dans l'Equation 6.22. En prenant cette condition comme critère de résolution, la fonction  $\Psi$  peut être exprimée par :

$$\Psi(d_{\text{min}}, \Delta) = \begin{cases} 1 - \frac{d_{\text{min}}}{5\Delta} & \text{si } 5\Delta > d_{\text{min}} , \\ 0 & \text{sinon} . \end{cases} \quad (6.32)$$

$\Psi : (\mathbb{R}^+)^2 \rightarrow [0, 1]$  est la fonction indicatrice de résolution de l'interface. Dans les cellules avec une taille caractéristique plus petite que les plus petites échelles de l'écoulement biphasique,  $\Psi \rightarrow 0$ , désactivant ainsi le modèle sous-maille de DAI. En revanche, si la taille de la cellule est beaucoup plus grande que la plus petite échelle de l'écoulement diphasique, alors on doit activer le modèle de sous-maille et  $\Psi \rightarrow 1$ . La fonction  $\Psi$  est représentée dans la Figure 6.7 pour une plage de tailles de cellules qui serait rencontrée dans un maillage pratique, allant de  $0 \mu\text{m}$  à  $500 \mu\text{m}$ , et tracé pour quatre valeurs de  $d_{\text{min}}$  allant de  $10 \mu\text{m}$  à  $200 \mu\text{m}$ .

## 6.4. Estimation du différentiel de vitesse

Le principal défi dans le modèle DAI présenté réside dans l'estimation précise des vitesses du gaz et du liquide ( $u_g$  et  $u_l$ ) impliquées dans la définition des nombres de Weber de l'Equation 6.26,


 FIGURE 6.7. – Fonction indicatrice de résolution  $\Psi$ 

l'Equation 6.29 et l'Equation 6.30. En effet, les estimations d'un nombre de Weber critique sont généralement données pour une structure liquide isolée de vitesse  $u_l$  immergée dans un écoulement gazeux uniforme non perturbé de vitesse  $u_g$  (Schiller et Naumann [1935]). En revanche, avec le modèle à interface diffuse à 4 équations utilisé dans cette étude (Section 3.2.2.3), une hypothèse d'équilibre local des vitesses est formulée. La vitesse dans une cellule est notée  $u$ , et est unique pour les deux fluides :  $u = u_g = u_l$ . Blanchard [2015] a montré que la vitesse du fluide  $u$  dans une cellule mixte contenant à la fois du liquide et du gaz peut être considérée comme étant égale à la vitesse du liquide, si la densité locale est proche de celle du liquide  $\rho_l$ , qui est elle-même nettement supérieure à la densité du gaz  $\rho_g$ . Cette condition, qui est considérée comme satisfaite pour  $\alpha_l \gg 10^{-3}$ , est vérifiée pour la majorité des cellules dans l'interface du noyau liquide, où le modèle de DAI est appliqué (Figure 6.9 (a)).

Pour déterminer la vitesse du gaz  $u_g$  responsable de l'atomisation des structures liquides, une approche possible consiste à utiliser la vitesse d'injection du gaz  $U_g$  pour estimer le nombre de Weber local d'une structure liquide. Cette approche fournit des valeurs précises du nombre de Weber local près du fond de chambre, où la vitesse du gaz est similaire à la vitesse d'injection. Cependant, cette approche conduirait à une surestimation du nombre de Weber dans la zone d'atomisation, en raison du ralentissement rapide du gaz causé par l'expansion du jet dans la chambre et le frottement engendré par la présence du liquide. Cette thèse propose une méthode alternative pour estimer la vitesse du gaz issu d'un injecteur coaxial pénétrant dans la chambre, basée sur des considérations de jet libre. En utilisant cette approche qui est détaillée ci-dessous, une estimation plus précise de la vitesse du gaz dans la zone d'atomisation peut être obtenue et permettre ainsi de fermer la modélisation de la densité d'aire interfaciale.

#### 6.4.1. Jets libres monophasiques

L'étude menée par Malmström *et al.* [1997] présente des données expérimentales sur la décroissance de vitesse ainsi que sur les profils de vitesse transversaux appliqué à un jet axisymétrique. Les auteurs montrent que pour une injection selon l'axe  $\vec{x}$ , la décroissance de la vitesse maximale axiale peut être modélisée par une loi simple en  $1/x$  :

$$\frac{u_{\text{axis}}(x)}{U_{\text{inj}}} = K \frac{D_{\text{inj}}}{x}, \quad (6.33)$$

avec  $U_{\text{inj}}$  la vitesse d'injection,  $u_{\text{axis}}(x)$  la vitesse axiale moyenne,  $D_{\text{inj}}$  le diamètre d'injection et un coefficient décroissance de vitesse  $K$ . Les profils de vitesse radiaux sont déterminés sous l'hypothèse d'auto-similarité par la loi suivante :

$$\frac{u(x, \eta)}{u_{\text{axis}}(x)} = e^{-\ln(2)\eta^2}, \quad (6.34)$$

où  $u(x, \eta)$  est la vitesse moyenne à la distance  $x$  du fond de chambre à une coordonnée transversale sans dimension  $\eta = r/r_{0.5}$  (également connue sous le nom de paramètre de similarité), avec  $r$  la distance par rapport à l'axe du jet et  $r_{0.5}$  le rayon où  $u(x, 1)/u_{\text{axis}}(x) = 0.5$ . Les équations 6.33 et 6.34 ont été étendues à diverses configurations de jets libres non circulaires résumées par Awbi [2003]. Par exemple, dans le cas des jets plans<sup>4</sup>, la loi de décroissance suit une diminution en  $1/\sqrt{x}$ . On peut noter que Malmström *et al.* [1997] ont démontré que le coefficient de décroissance  $K$  reste indépendant des conditions d'injection  $U_{\text{inj}}$  et  $D_{\text{inj}}$ .

### 6.4.2. Décroissance de la vitesse maximale pour un jet coaxial diphasique

Pour évaluer une loi de décroissance de la vitesse dans un jet coaxial liquide-gaz, deux lois de décroissance de la vitesse du gaz  $u_{g,\text{max}}$ , adaptées aux jets libres ronds (rnd) et aux jets plans (pla), sont ajustées à la décroissance de la vitesse du gaz d'une injection coaxiale à partir des données DNS :

$$u_{g,\text{max},\text{rnd}} = u_{\infty} + U_g \times K \times \frac{h_g}{x}, \quad (6.35)$$

et

$$u_{g,\text{max},\text{pla}} = u_{\infty} + U_g \times K \times \left(\frac{h_g}{x}\right)^{0.5}. \quad (6.36)$$

Pour garantir une valeur non nulle de la vitesse du gaz en champ lointain, une constante  $u_{\infty}$  est ajoutée aux équations de décroissance de vitesse, et a permis d'obtenir de meilleures corrélations. Les coefficients  $u_{\infty}$  et  $K$  obtenus sur la configuration coaxiale sont donnés dans le Tableau 6.2. Ces coefficients sont spécifiques à la géométrie coaxiale et diffèrent de ceux trouvés pour les configurations de jets libres plans et ronds. En effet, la géométrie de la configuration coaxiale est significativement différente et la présence d'un jet liquide influence l'écoulement gazeux. Les deux fonctions ajustées, avec les paramètres fournis dans le Tableau 6.2, présentent une excellente concordance avec la décroissance de la vitesse du gaz, comme le montre la Figure 6.8.

De légères différences sont observées, en particulier dans la région comprise entre  $1.5$  et  $7.5 D_1$ . Les écarts observés pour la fonction ajustée en  $\sqrt{1/x}$  semblent être plus significatives dans la région entre  $1.5$  et  $5.0 D_1$ . En revanche, la fonction ajustée en  $1/x$  présente une bonne concordance dans cette zone, mais présente des différences par rapport aux données DNS entre  $3$  et  $7.5 D_1$ . Étant donné que le processus d'atomisation commence à  $1.5 D_1$  et atteint son maximum à  $2.5 D_1$  (Section 4.4.2.3), le choix est fait d'utiliser la fonction de décroissance de la vitesse en  $1/x$  car elle mieux corrélée à la DNS dans cette zone. On peut noter que la fonction ajustée en  $1/x$  surestime légèrement la vitesse du gaz en champ lointain, ce qui ne pose pas de problème car la production de densité d'aire d'interface est concentrée entre  $1.5$  et  $3.0 D_1$ .

	Rond Malmström <i>et al.</i> [1997]	Plan Cao <i>et al.</i> [2013]	Coaxial $1/x$	Coaxial $1/\sqrt{x}$
$u_{\infty}$ ( $m.s^{-1}$ )	0	0	1.15	-3.46
$K$	[5.8 : 6.0]	[2.5 : 3.5]	3.70	1.93

TABLE 6.2. – Coefficients des lois de décroissance  $K$  et  $u_{\infty}$  pour des écoulements libres issus d'injecteurs ronds, plans et coaxiaux

4. Injecteurs rectangulaires de longueur infinie

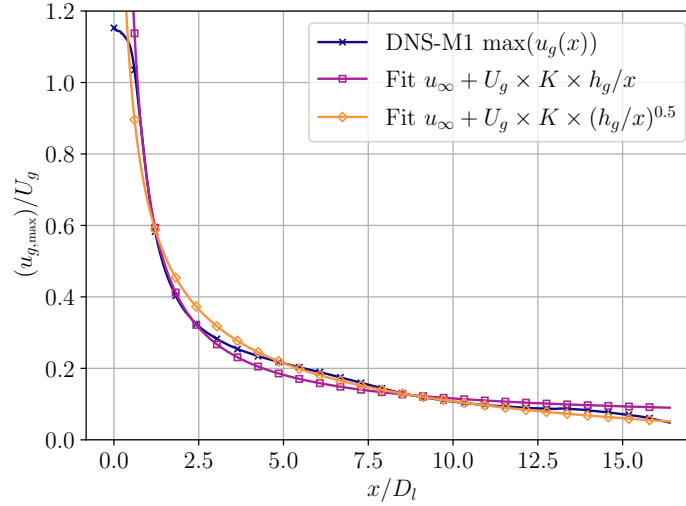


FIGURE 6.8. – Décroissance de la vitesse du gaz de la simulation DNS-M1 avec les fonctions de décroissance en  $1/x$  et  $1/\sqrt{x}$

### 6.4.3. Vitesse de gaz non dévié

La vitesse du gaz est reconstruite dans tout le domaine en utilisant la loi de décroissance en  $1/x$  de l'Equation 6.35 et en supposant l'auto-similarité des profils de vitesse transverses. Cette reconstruction de la vitesse du gaz est effectuée sans tenir compte de la présence du liquide sur le rayon interne, la rendant équivalente à la vitesse du gaz non déviée, telle que perçue par le liquide lors du processus d'atomisation, et notée  $u_{g,rec}$  à n'importe quelle position  $x$  et  $r$  :

$$u_{g,rec}(x, r) = e^{-\ln(2)\eta^2} \times \left( u_\infty + U_g \times \frac{h_g}{x} \right) . \quad (6.37)$$

En supposant que la vitesse locale est égale à la vitesse du liquide  $u_l$  et en reconstruisant la vitesse du gaz non défléchié  $u_{g,rec}$  en se basant sur les considérations des jets libres, l'écart de vitesse  $\Delta V_{rec}$  utilisé dans les sections suivantes pour le modèle de densité d'aire d'interface présenté dans la Section 6.3, est donné par :

$$\Delta V_{rec} = u_{g,rec} - u \quad (6.38)$$

## 6.5. Validation de la modélisation

La section suivante se concentre sur la validation du modèle de densité d'aire interfaciale détaillé dans la Section 6.3 en l'appliquant sur les configurations présentées dans la Section 6.2. La validation sera effectuée en comparant les résultats de la simulation LES-M9 avec le modèle de DAI à la DAI géométrique de la simulation DNS-M1 de référence (Section 4.4.2.3). Le nombre de Weber critique est choisi à 3.5 dans les sections 6.5.1 et 6.5.4 comme étant la valeur donnant les meilleurs résultats. Ce choix est compris dans le spectre identifié dans la Section 6.3.2 et la sensibilité du modèle au choix de cette valeur est étudiée dans la Section 6.5.5.2. Le calcul est effectué sur un temps physique de 39 ms pour permettre de converger les moyennes des champs de densité d'aire interfaciale.

### 6.5.1. Observations qualitatives

Une vue en coupe dans un plan transverse (de normale  $\vec{z}$ ) des champs instantanés de la simulation réalisée peut être observée sur la Figure 6.9. La plage de rayon tracés s'étend de  $-1.0 D_1$  à  $1.0 D_1$  et couvre la région allant du fond de chambre à  $x = 10 D_1$ . Les champs représentés

sont la fraction volumique de liquide  $\alpha_l$ , les composantes résolues (Equation 6.22), sous-maille (issu de l'équation de transport 6.15) et totale de la densité d'aire interfaciale (Equation 6.21). Le champ instantané de  $\alpha_l$  montre une section du cœur liquide déstabilisé ainsi que plusieurs structures liquides détachées. On peut voir que le modèle dense sur le maillage LES-M9 est capable de résoudre le jet liquide attaché à l'injecteur et ses déformations, mais il ne peut pas résoudre les structures plus petites à mesure qu'elles sont advectées, devenant de plus en plus diffuses à mesure que l'atomisation et la fragmentation se produisent par réduction de leur taille. Le champ de la Figure 6.9 (b) correspond à la densité d'aire interfaciale résolue et est tracé en échelle logarithmique. Il montre clairement les interfaces des principales structures liquides de l'écoulement par des valeurs élevées de  $\Sigma_{\text{res}}$ , mais aussi des valeurs plus faibles pour les structures liquides les plus diffuses, indiquant une sous résolution de la densité d'aire interfaciale. C'est dans ces zones de sous-résolution que le modèle s'active, générant de la densité d'aire interfaciale de sous-maille observable sur la Figure 6.9 (c). Une distinction notable entre les champs  $\Sigma_{\text{res}}$  et  $\Sigma'$  est que  $\Sigma_{\text{res}}$  se situe sur la frontière extérieure de l'interface où la fraction volumique de liquide est faible, tandis que la densité d'aire interfaciale de sous-maille  $\Sigma'$  est également générée à des fractions volumiques de liquide plus élevées. Cette caractéristique découle de la modélisation de l'interface diffuse et ne serait pas observée dans les méthodes utilisant des représentations d'interface reconstruites (non diffuse).

### 6.5.2. Validation du cœur liquide

Comme indiqué dans la Section 6.2, les résultats DNS permettent une comparaison directe des sorties LES du modèle de DAI. Pour comparer les résultats entre les deux simulations, des moyennes temporelles ont été réalisées sur tous les pas de temps disponibles (en éliminant le régime transitoire), ainsi que des moyennes spatiales azimutales, en supposant que l'écoulement est en moyenne axisymétrique. La première validation quantitative est effectuée sur le champ de liquide résolu par le solveur de phase dense. Comme le montre Figure 6.9 (a), la méthode de la phase dense est capable de capturer le jet de liquide continu qui s'étend du fond de chambre jusqu'à environ  $2-3 D_1$ . Une estimation de la longueur de rupture du cœur liquide peut être obtenue à partir du champ moyen de fraction volumique de liquide. Une comparaison des champs de fraction volumique de liquide moyen de la LES et de la DNS est présentée sur la Figure 6.10, avec deux iso-contours  $\alpha_l = 1$  et  $\alpha_l = 0,5$ , correspondant aux valeurs pouvant être estimées par les corrélations 2.39 et 2.40. Les résultats de la DNS montrent une longueur de rupture plus courte pour les deux iso-contours, respectivement à environ  $1.5 D_1$  et  $2.2 D_1$ . Inversement, la LES à interface diffuse prévoit environ  $1.8 D_1$  pour le premier iso-contour et plus de  $3.2 D_1$  pour le second. Ce résultat est prévisible, car la méthode à interface reconstruite de la DNS nécessite moins de mailles pour résoudre une structure liquide qu'une interface diffuse (Section 4.4.2.2 et Chapitre 5). Le maillage étant bien plus fin sur la DNS, le développement des instabilités interfaciales y est plus rapide que sur la LES. Avec ces observations, on s'attend à ce que le filtrage du maillage de la simulation LES entraîne un retard sur le développement des instabilités et donc sur le phénomène d'atomisation.

### 6.5.3. Validation de l'épaisseur de couche de mélange

Afin de mieux comprendre cette différence entre les simulations qui peut affecter le modèle de DAI, l'épaisseur de couche de mélange est une quantité clé pour l'atomisation assistée et est étudiée près de la zone d'injection. L'évolution de la couche de mélange implique l'échange de quantité de mouvement entre les deux fluides et est pilotée par le différentiel de vitesse, de viscosité, et de densité des deux fluides. Afin de calculer l'épaisseur de la couche de mélange, la distance radiale entre les positions de 99% des vitesses maximales du liquide et du gaz sur les champs moyen de vitesse est mesurée. Cette définition diffère de celle de l'Equation 2.10 et est choisie car elle est plus pertinente, évitant d'estimer le maximum du gradient de vitesse qui peut être délicat notamment près de la lèvre où les couches limites du liquide et du gaz n'ont pas encore interagi. De plus, le gradient de vitesse est aussi sous-résolu dans ces zones où il a des valeurs très élevées. L'évolution de la couche de mélange de la DNS et de la LES-M9 est présentée



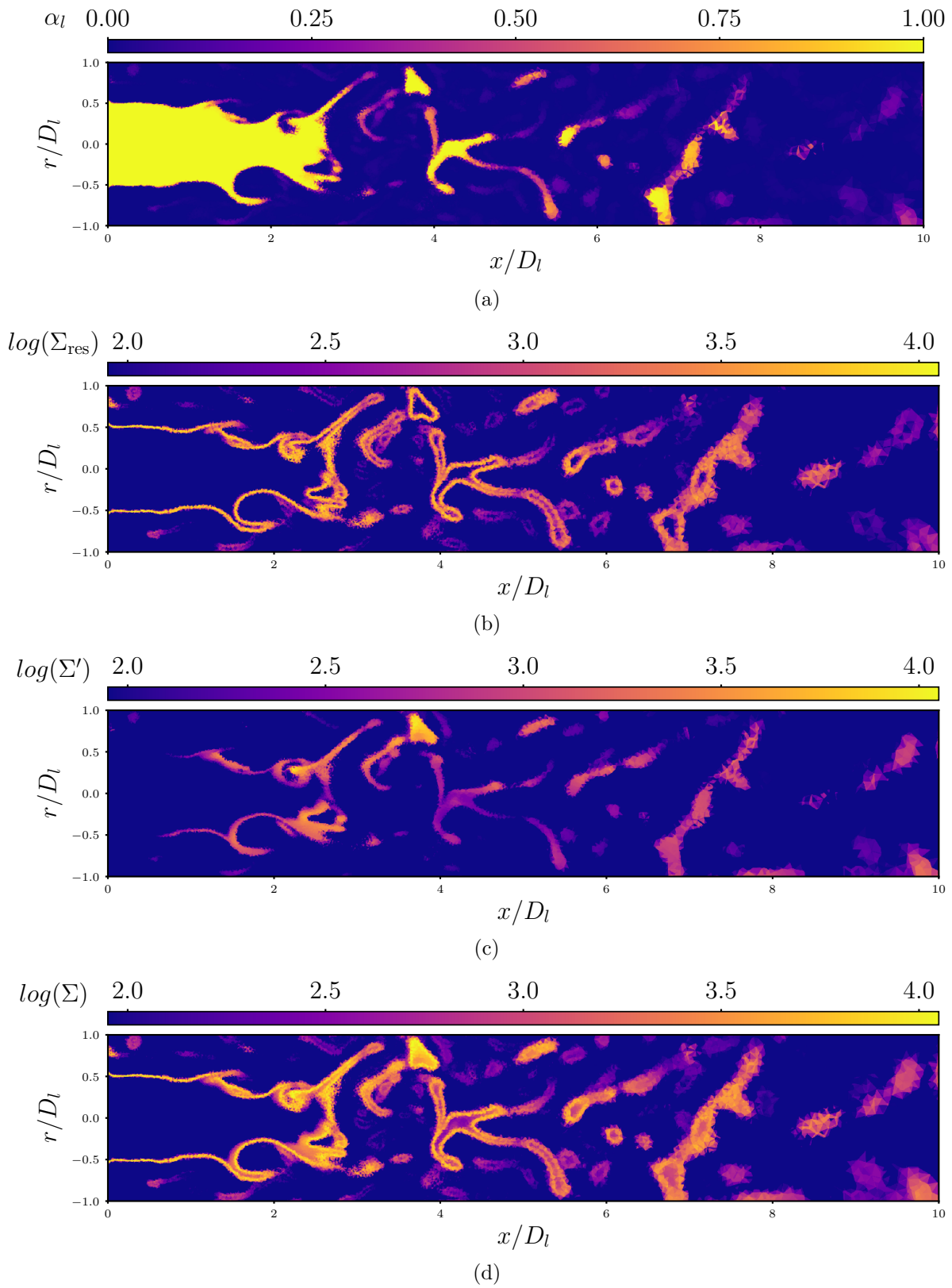


FIGURE 6.9. – Champs instantanés de la LES-M9 avec le modèle de DAI. (a) Fraction volumique de liquide  $\alpha_l$ , (b) DAI résolue  $\Sigma_{\text{res}}$ , (c) DAI de sous-maille  $\Sigma'$  et (d) DAI totale  $\Sigma = \Sigma_{\text{res}} + \Sigma'$

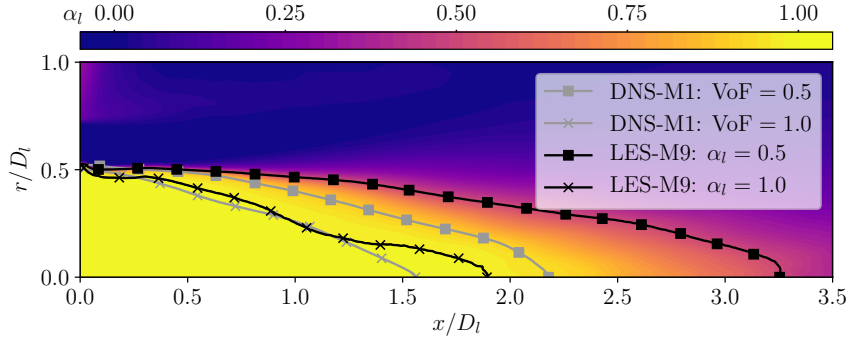


FIGURE 6.10. – Comparaison de la longueur de cœur liquide entre les maillages LES-M9 et DNS-M1

dans la Figure 6.11, ainsi que les régressions linéaires correspondantes indiquées par des lignes en pointillés. La croissance de l'épaisseur de la couche de mélange présente une tendance linéaire, mise en évidence par les régressions.

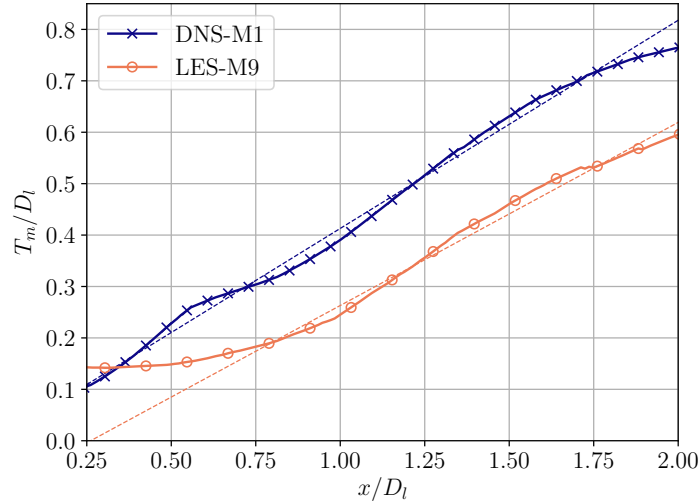


FIGURE 6.11. – Évolution de l'épaisseur de couche de mélange pour la LES-M9 et DNS-M1

Dans une couche de mélange présentant un rapport de densité relativement faible, l'Equation 2.15 donne un taux d'accroissement de couche de mélange  $C_s \sim 0.17$ . Comme le montre Figure 6.11, la pente actuelle de l'évolution de l'épaisseur de la vorticité peut être estimée dans la DNS (et donc de la LES) autour de 0.40, ce qui correspond à  $C_s \simeq 0.137$ . Cette valeur est légèrement inférieure à la corrélation expérimentale. La couche de mélange s'épaissit donc plus lentement que la corrélation de Papamoschou et Roshko [1988]. Cela peut s'expliquer par trois facteurs principaux : premièrement, l'épaisseur de la lèvre qui sépare l'injection du liquide et du gaz à l'initialisation de la couche de mélange, et conduit à un rapport de vitesse  $\mathcal{R}_U$  plus faible que celui estimé à l'injection car la vitesse du gaz diminue rapidement (Figure 6.8). Deuxièmement, le rapport de densité est beaucoup plus élevé dans le cas présent et n'est pas dans le domaine de validité (vérifié) de la corrélation (82 dans le cas présent). Ceci pourrait modifier considérablement le mécanisme physique impliqué dans le mélange. Enfin, la méthode de mesure de l'épaisseur de la couche de mélange donne une grande variété de résultats. Barone *et al.* [2006] donnent des coefficients  $C_s$  allant de 0.136 à 0.165 selon la méthode de mesure. Dans des travaux futurs, il serait intéressant d'étudier finement le phénomène impliqué dans l'épaississement de la couche de vorticité car il joue un rôle crucial dans le processus d'atomisation.

Comme prévu, la DNS présente systématiquement une couche de mélange plus épaisse que la



LES-M9 à la même distance  $X$  du fond de chambre. En effet, l'épaisseur de couche de mélange de la LES reste pratiquement inchangée jusqu'à  $0.5 D_1$  du fond de chambre, alors que dans la DNS, le comportement linéaire est apparent dès la position  $x = 0.25 D_1$ . À partir d'environ  $1 D_1$ , l'épaisseur de couche de mélange LES devient également linéaire. Il est intéressant de voir que le taux d'accroissement de la couche de mélange LES est très similaire à celui de la DNS, en d'autres termes, le développement de la couche de mélange est similaire, mais retardé de  $0.75 D_1$ . Ceci peut être attribué à l'effet de filtrage de la LES, qui retarde la croissance des tourbillons et donc du développement de l'épaisseur de la couche de mélange.

#### 6.5.4. Validation densité d'aire interfaciale

La Figure 6.12 montre les profils radiaux moyennés dans le temps et en azimuth de la densité d'aire interfaciale pour les simulations LES-M9 et DNS-M1, à différentes positions  $X = 1, 2, 3, 4$ . Comme indiqué dans les sections 6.5.2 et 6.5.3, le développement des instabilités du cœur liquide et de la couche de mélange présente un retard spatial constant d'environ  $0.75 D_1$  pour la LES. Par conséquent, les profils DNS sont comparés aux profils LES situés à une distance en aval corrigée de cet écart, c'est-à-dire  $X_{LES} = X_{DNS} + \text{écart}$ . Les profils tracés sont ceux de la densité d'aire interfaciale résolue  $\Sigma_{res}$  (à partir de Equation 6.22), prédits par le modèle de sous maille (à partir de Equation 6.15)  $\Sigma'$  et leur somme  $\Sigma$ .

La Figure 6.12 (a) montre les profils à un diamètre liquide du fond de chambre. Près de l'axe, la DNS prédit une densité d'interface presque nulle car cet emplacement est occupé par le cœur liquide. Une légère augmentation de  $\Sigma_{res}$  indique la présence d'une interface diffuse, dont l'épaisseur augmente en aval. Un pic est visible sur la DNS-M1 et  $\Sigma_{res}$  près de  $X_{DNS} = 0.5$ , ce qui indique une forte interaction entre les phases et une production d'interface. Dans cette zone, le modèle de sous maille ajoute une petite quantité de  $\Sigma'$ , qui complète bien celle de la quantité résolue : la somme totale  $\Sigma$  est presque superposée aux valeurs DNS. Une diminution abrupte de toutes les courbes plus loin de l'axe indique une zone principalement occupée par le gaz.

À un diamètre liquide plus en aval ( $x = 2 D_1$ ) tracé sur la Figure 6.12 (b), la courbe DNS montre un pic plus large causé par la déformation du cœur liquide et la présence de structures détachées générées par l'atomisation primaire. La DAI résolue  $\Sigma_{res}$  montre un comportement similaire mais sous estime de 50% la DAI de . Encore une fois, en ajoutant la contribution de la DAI de sous-maille  $\Sigma'$ , la DAI totale correspond au résultat DNS. De manière intéressante, le modèle est capable de capturer correctement les petites échelles qui contribuent à une part importante de la DAI totale pour  $R = r/D_l < 0.5$ , tandis que pour  $R > 0.5$ , les valeurs résolues et modélisées contribuent également à la DAI totale. Un petit pic est observé à  $R = 1.3$ , correspondant au liquide accumulé dans la zone de recirculation qui est atomisé par l'écoulement de gaz juste après l'injecteur et qui n'est pas observé dans la DNS.

À  $X_{DNS} = 3$ , la Figure 6.12 (c) montre des profils plus diffus. Pour  $R < 0.4$ , la DAI totale de la LES est légèrement sous-estimée, mais elle continue à bien correspondre à celle de la DNS jusqu'à  $R = 1$ . À des distances radiales plus importantes, il semble y avoir une légère surestimation due à la présence de  $\Sigma'$  s'ajoutant à une DAI résolue  $\Sigma_{res}$  déjà suffisante.

Enfin, la Figure 6.12 (d) présente des résultats similaires à la Figure 6.12 (c) ; cependant, la légère surestimation observée loin de l'axe d'injection est maintenant présente sur tous les rayons. Cela met en évidence une limitation de la formulation actuelle, qui se concentre uniquement sur les mécanismes de création d'interface et ne tient pas compte de ceux de destruction de l'interface.

Dans l'ensemble, les résultats obtenus par la somme du modèle de DAI de sous-maille à la DAI résolue sont très satisfaisants, compte tenu de la difficulté de la tâche et du nombre de termes jouant un rôle dans la modélisation de l'Equation 6.23. Afin d'augmenter la confiance dans le modèle, une étude sur la sensibilité aux paramètres les plus pertinents et à la taille du maillage LES a été menée, les résultats sont présentés dans les sections suivantes.

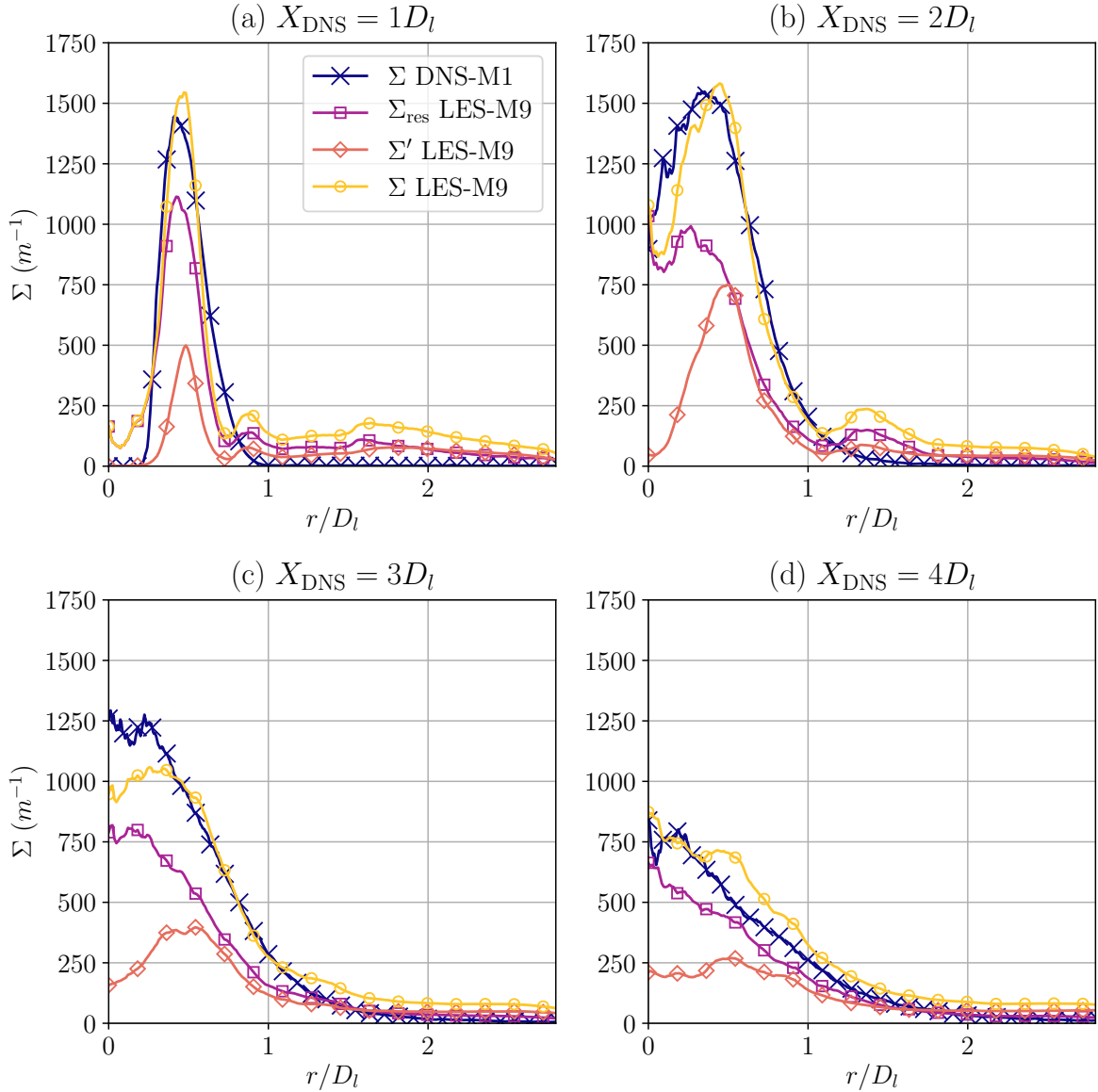


FIGURE 6.12. – Profils de densité d’aire interfaciale aux positions  $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4$  pour la DNS-M1 de référence ainsi que pour la LES-M9 avec le modèle de sous maille à  $We_{\text{cr}} = 3.5$

### 6.5.5. Convergence en maillage et sensibilité du modèle

#### 6.5.5.1. Convergence en maillage

La méthode numérique proposée repose sur l’hypothèse que le modèle de phase dense et le modèle de DAI peuvent respectivement traiter les grandes échelles diphasiques de l’écoulement et les échelles de sous-maille, correspondant principalement à la phase mixte et dispersée. Le filtre qui sépare les grandes des petites échelles, est la taille de la maille LES. Idéalement, un raffinement de maillage sans restriction conduirait le modèle de phase dense à fournir une solution DNS précise de l’écoulement, où  $\Sigma_{\text{res}}$  représenterait la DAI totale; inversement, une maille très grossière donnerait une zone d’interface très mal résolue, forçant le modèle à reconstruire les petites et les grandes échelles.

La principale hypothèse réalisée dans la construction du modèle de DAI est que le solveur de phase dense est capable de résoudre au moins les plus grandes échelles impliquées dans l’atomisation primaire du jet, telles que le cœur liquide, les instabilités interfaciales, et les plus grands

ligaments (voir Figure 6.5 et Figure 6.9 (a)). Avec cette hypothèse, la phase dense fournit au modèle des données locales de l'écoulement appropriées, telles que la vitesse du liquide. Il est évident que différentes résolutions de maillage LES modifieraient la qualité de la solution de la phase dense et la contribution relative du modèle.

Pour mieux caractériser cet effet, plusieurs simulations avec différentes résolutions de maillage LES ont été effectuées, en conservant le même  $We_{cr} = 3.5$ , et comparées entre elles et ainsi qu'à la DNS-M1 de référence. La Figure 6.13 montre les mêmes profils radiaux de DAI moyennés dans le temps et dans l'espace à différentes positions  $X_{DNS}$  pour la DNS et les trois maillages décrits dans la Section 6.2.1. Les profils montrent un très bon accord sur la DAI totale pour les trois maillages LES M5, M9 et M20, montrant ainsi la capacité du modèle à s'adapter à la résolution de la phase dense locale (en particulier de son interface), en adaptant l'équilibre entre  $\Sigma_{res}$  et  $\Sigma'$ . Certaines différences peuvent être observées au niveau du pic initial à  $X_{DNS} = 1$ , et en aval à  $X_{DNS} = 4$ .

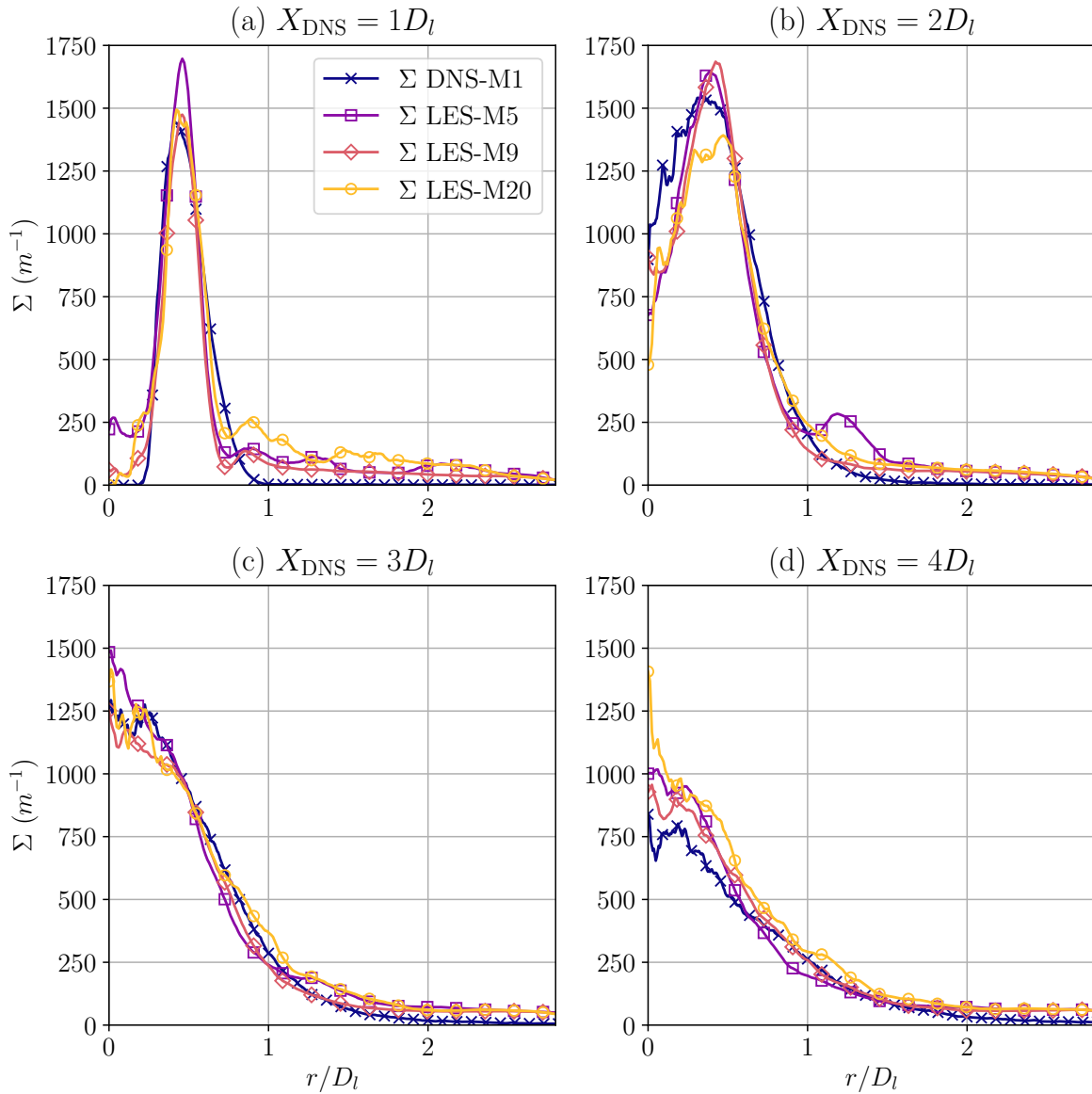


FIGURE 6.13. – Profils de DAI des simulations LES-M5, LES-M9, LES-M20, DNS aux positions  $X_{DNS} = 1, 2, 3, 4$  avec  $We_{cr} = 3.5$

## 6.5.5.2. Weber critique

Le nombre de Weber critique décrit dans Section 2.3.3 joue un rôle clé dans l'évaluation de la plus petite échelle liquide locale admissible  $\Sigma_{cr}$ , définie dans l'Equation 6.29. En conséquence, la sensibilité du modèle de DAI au choix du Weber critique est étudiée dans cette section. Les profils de DAI obtenus à partir des simulations LES avec différentes valeurs de  $We_{cr} = \{1, 3, 4, 5, 7\}$  sont comparés aux profils DNS  $\Sigma$  aux positions  $X_{DNS} = \{1, 2, 3, 4\}$  dans Figure 6.14. Cette étude paramétrique vise à évaluer l'impact de la variation de  $We_{cr}$  sur la précision des prédictions de DAI par le modèle.

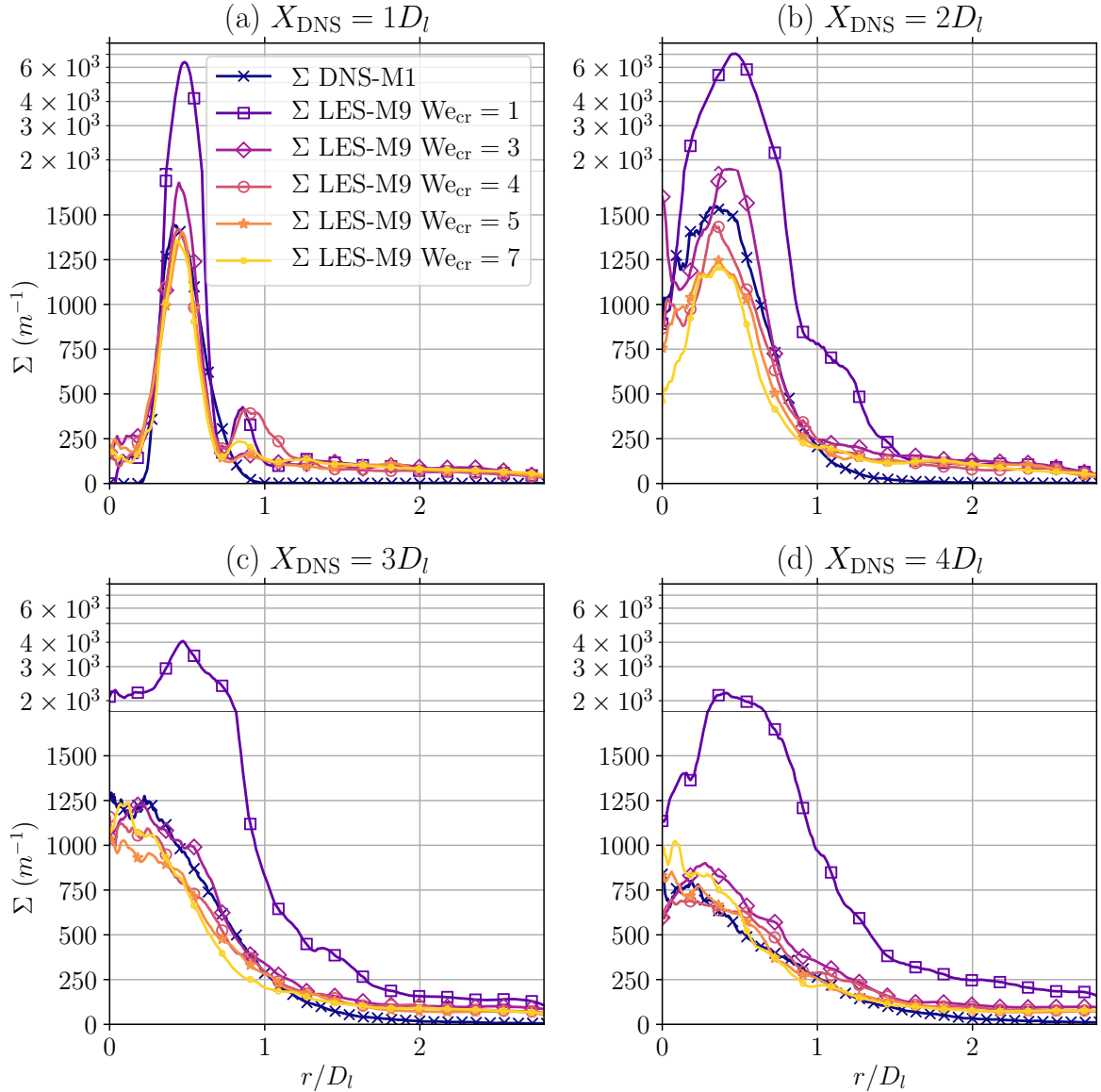


FIGURE 6.14. – Profils de DAI aux positions  $X_{DNS} = 1, 2, 3, 4$  pour la DNS la simulation LES-M9 avec  $We_{cr} = 1, 3, 4, 5, 7$

Avec  $We_{cr} = \{3, 4, 5, 7\}$ , le modèle de DAI montre un bon accord avec les résultats DNS dans cette configuration. Comme prévu, un  $We_{cr}$  plus élevé conduit à des valeurs plus faibles de  $\Sigma$  en moyenne. Cela s'explique par le fait qu'un  $We_{cr}$  plus élevé implique que les structures atomisées se stabilisent à des nombres de Weber plus élevés et cessent donc de créer de l'interface à des différentiels de vitesse plus importants. Parmi les valeurs testées de  $We_{cr}$ , la plus grande ( $We_{cr} = 7$ ) montre toujours un bon accord avec la DNS, avec seulement une sous-estimation de la DAI totale d'environ 20% à la position la plus défavorable ( $X_{DNS} = 3D_l$ ). En revanche, le

choix de  $We_{cr} = 1$  conduit à une surestimation significative de  $\Sigma$ . Ces résultats indiquent que le modèle de DAI est relativement peu sensible au nombre de Weber critique, à condition qu'il soit choisi avec soin dans une fourchette appropriée, de préférence surestimé plutôt que sous-estimé telle que des valeurs de  $We_{cr}$  comprises entre 3 et 7. En outre, les valeurs du nombre de Weber critique observées par Averseng [2022] sur des nappes liquides périodiques, se situent entre 2 et 4, renforcent la valeur de  $We_{cr}$  choisie dans ce manuscrit.

### 6.5.5.3. Fonction indicatrice d'atomisation $\lambda_{atom}$

Cette section présente une étude paramétrique qui étudie l'influence des coefficients  $a_\lambda$  et  $b_\lambda$  de la fonction  $\lambda_{atom}$  sur le modèle de DAI. La [Tableau 6.3](#) donne les détails sur les variations des paramètres, tandis que les fonctions résultantes sont tracées sur la [Figure 6.15](#). Les coefficients  $a_\lambda$  et  $b_\lambda$  contrôlent la forme de la fonction  $\lambda_{atom}$ , qui détermine la position de la création de DAI. La modification de ces coefficients permet d'explorer différents scénarios et d'évaluer leur impact sur les prédictions du modèle.

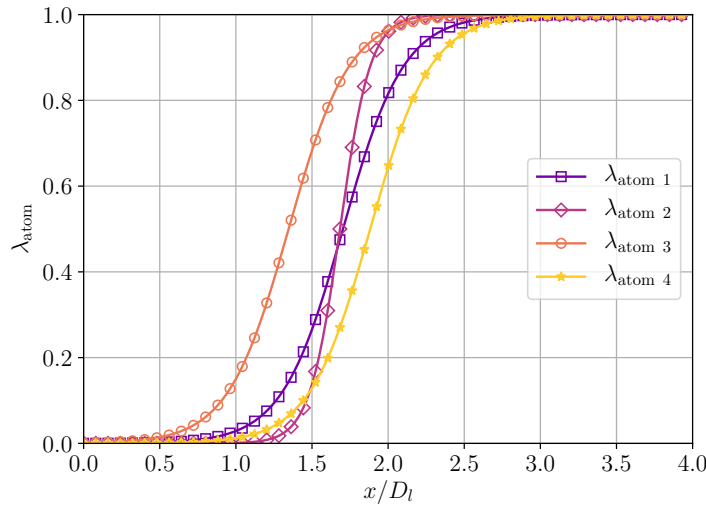


FIGURE 6.15. – Fonction indicatrice d'atomisation  $\lambda_{atom}$  pour les paramètres  $a_\lambda$ ,  $b_\lambda$  définis dans le [Tableau 6.3](#)

	$\lambda_{atom\ 1}$	$\lambda_{atom\ 2}$	$\lambda_{atom\ 3}$	$\lambda_{atom\ 4}$
$X_{atom}$	2.14	2.14	1.79	2.32
$\lambda_{atom}(X_{atom})$	0.9	0.99	0.9	0.9
$b_\lambda$	5.0	10.0	5.0	5.0
$a_\lambda$	1.70	1.68	1.35	1.88

TABLE 6.3. – Paramètres de la fonction indicatrice d'atomisation  $\lambda_{atom}$  étudiés

Sur la [Figure 6.16](#), les profils de DAI aux positions  $X_{DNS} = 1, 2, 3, 4$  sur les maillages DNS et LES-M9 sont tracés pour les différentes fonctions  $\lambda_{atom}$  définies précédemment. À l'exception de la fonction  $\lambda_{atom\ 3}$ , les autres fonctions donnent des résultats consistants. La fonction  $\lambda_{atom\ 3}$  sous-estime la position de la création de DAI en raison d'un coefficient  $b_\lambda$  relativement faible, ce qui entraîne un écart important entre la production prédite de DAI et les résultats de la DNS. Ceci induit une production de DAI beaucoup plus proche du fond de chambre que ce qui est observé sur la DNS, dans une zone où le différentiel de vitesse entre le gaz et le liquide est très

élevé. Ainsi, on observe une large surestimation de la production de DAI sur les profils de la Figure 6.16. D'autre part, la fonction  $\lambda_{\text{atom } 4}$  a été choisie pour étudier l'impact d'une légère surestimation du paramètre  $X_{\text{atom}}$ . Cette fonction présente une sous-estimation maximale de la production de DAI d'environ 10%.

Ces résultats mettent en évidence la sensibilité du modèle de DAI au choix de la fonction  $\lambda_{\text{atom}}$  et l'importance de déterminer avec précision la position de création de DAI pour des prédictions fiables.

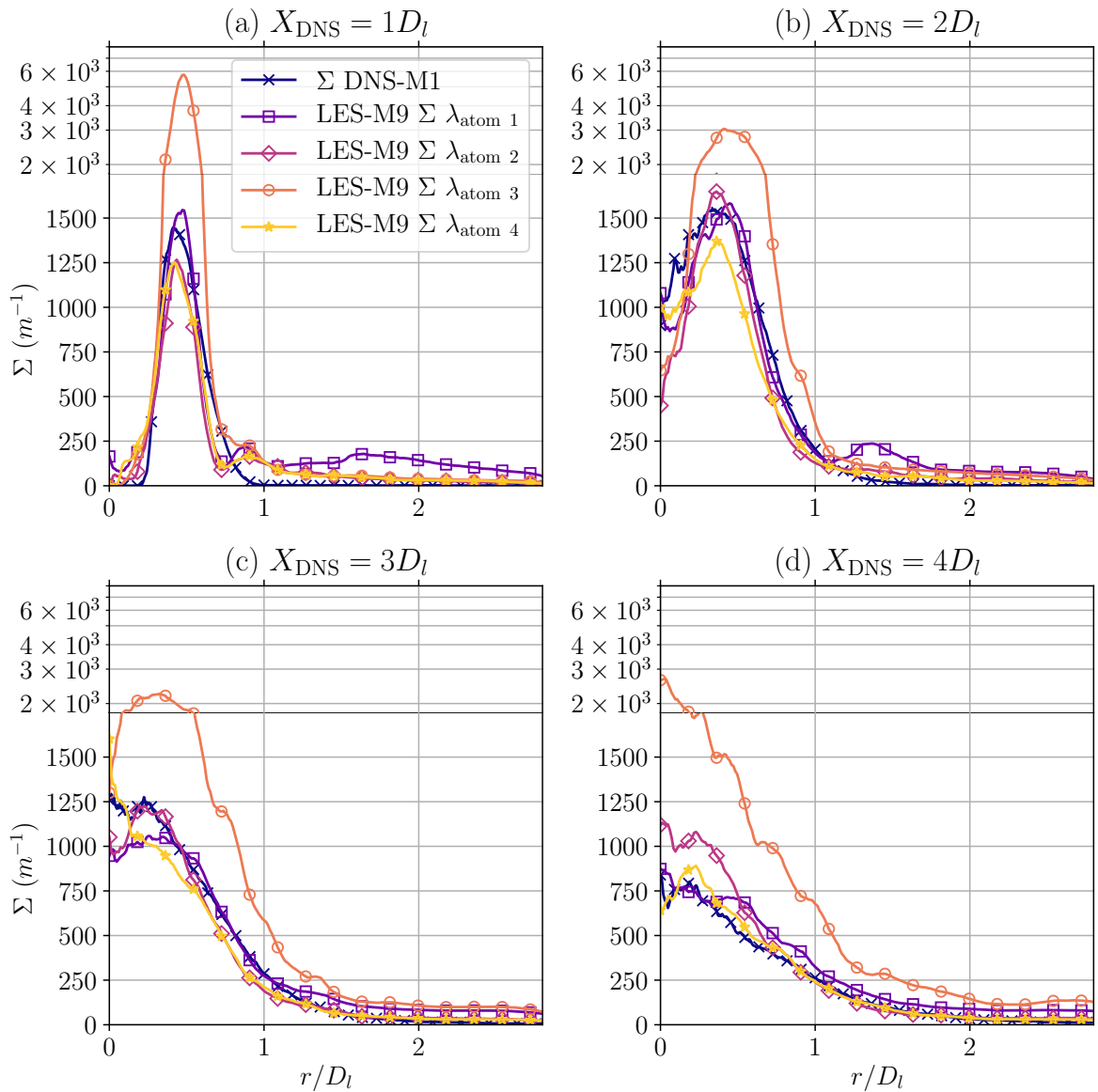


FIGURE 6.16. – Profils de DAI aux positions  $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4$  avec le maillage LES-M9 pour les fonctions  $\lambda_{\text{atom}}$  définis dans le Tableau 6.3 avec  $We_{\text{cr}} = 3.5$

## Bilan

Ce chapitre présente une étude sur la modélisation de la densité d'aire interfaciale pour la simulation LES de l'atomisation d'un jet coaxial. L'approche proposée est basée sur le couplage d'un solveur dense d'interface diffuse et d'un modèle de densité d'aire interfaciale de sous-maille pour caractériser l'ensemble des échelles pertinentes de l'atomisation assistée par jet de liquide. Le modèle a été validé avec succès par des comparaisons avec des données DNS présentées dans la [Section 4.4.2.3](#) sur plusieurs maillages.

Basée sur les travaux initiaux de [Chesnel \*et al.\* \[2011\]](#) sur la DAI appliquée à des jets Diesel, la formulation proposée dans ce chapitre est adaptée à la physique rencontrée dans les jets coaxiaux que l'on trouve typiquement dans les LRE. Contrairement à l'atomisation mécanique observée dans les jets diesel, l'atomisation d'un jet issu d'un injecteur coaxial est principalement générée par le cisaillement du liquide par co-courant gazeux à grande vitesse, connue sous le nom d'atomisation assistée.

Cette différence fondamentale dans le mécanisme d'atomisation a nécessité le développement d'une nouvelle approche de modélisation pour capturer la création de l'interface dans cette application spécifique. La formulation du modèle prend en compte plusieurs termes liés à la localisation de l'atomisation, à la fréquence caractéristique de création d'interface, à la taille critique des gouttelettes ainsi qu'à la taille de maille locale. Dans la modélisation proposée, comme la modélisation diphasique à 4 équations ne permet pas d'obtenir une vitesse locale à la fois pour le liquide et le gaz, une modélisation spécifique du différentiel de vitesse entre le liquide et le gaz a été proposée et incorporée avec succès dans le modèle de DAI. Il convient de noter que le modèle de DAI pourrait être simplifié en utilisant directement les vitesses du liquide et du gaz à partir du modèle à 7 équations de Baer-Nunziato, éliminant ainsi la nécessité de modéliser explicitement le différentiel de vitesse.

Un nombre de Weber critique est utilisé pour estimer l'équilibre local entre la tension de surface et la contrainte de cisaillement, arrêtant ainsi la production d'interface. Dans la configuration étudiée, le choix de  $We_{cr} = 3.5$  a montré le meilleur accord avec les données de la simulation DNS-M1 de référence dans la région d'atomisation primaire. Sans surprise, ce résultat s'écarte de la prédiction de [Pilch et Erdman \[1987\]](#), principalement en raison de la nature non sphérique des structures atomisées et de la complexité de l'écoulement produit pendant l'atomisation primaire. Néanmoins, le modèle de DAI présente une sensibilité relativement faible au choix du nombre critique de Weber, puisque d'excellents accords avec la référence sont obtenus pour un nombre de Weber critique pris entre 3 et 7. Cette caractéristique favorable du modèle encourage son application dans d'autres configurations où des résultats de référence ne sont pas disponibles, à condition de choisir des valeurs  $We_{cr}$  proches de celles déterminées dans cette étude.

La DAI présente un potentiel pour diverses applications. Tout d'abord, dans un cadre d'écoulement réactif, elle peut être directement utilisée pour estimer la quantité d'interface locale, et évaporer une quantité de liquide proportionnelle à la DAI. Une autre application consiste à utiliser la DAI pour définir le diamètre de Sauter de la goutte  $d_{32}$  pour le couplage avec les solveurs de phase dispersée LES eulériens ou lagrangiens. Ce couplage permet d'intégrer la dynamique et les interactions des gouttelettes, ce qui est essentiel pour simuler les phénomènes de phase dispersée dans les écoulements multiphasiques [Rutard \*et al.\* \[2020\]](#). C'est cette approche qui sera explorée dans le [Chapitre 7](#).



# Simulation LES de l'atomisation d'un jet coaxial

L'objectif de ce chapitre est d'appliquer la méthodologie aux grandes échelles diphasiques du [Chapitre 5](#) et la modélisation de l'atomisation des petites échelles par la densité d'aire interfaciale du [Chapitre 6](#) pour réaliser une simulation diphasique où l'on se propose de calculer toutes les échelles diphasiques.

Le chapitre débute par une présentation du couplage effectué entre le solveur phases séparées CHARME et le solveur phase dispersée SPIREE avec la modélisation de la densité d'aire interfaciale développée dans cette thèse. Ensuite, les résultats préliminaires de ce couplage appliqué à la configuration LES-M9 sont introduits d'abord sur des quantités globales de l'écoulement puis en se concentrant sur la zone d'atomisation texturale, où le terme source du modèle de densité d'aire interfaciale est principalement activé.

L'analyse de ces résultats préliminaires met en évidence des perspectives d'un futur couplage. Dans un second temps, une proposition d'un nouveau modèle de densité d'aire interfaciale unifié, englobant à la fois les mécanismes d'atomisation mécanique et assistée est développée ainsi que des propositions d'étude pour l'estimation de la vitesse du gaz afin d'étendre son domaine de validité à d'autres configurations.

Enfin, on présente de manière succincte les travaux réalisés dans cette thèse pour fournir des données de validation du spray à partir d'images expérimentales.

## Sommaire

<b>7.1. Couplage CHARME-SPIREE</b>	<b>134</b>
<b>7.2. Application du couplage sur un cas pratique</b>	<b>135</b>
7.2.1. Configuration d'étude	135
7.2.2. Quantités globales	136
7.2.3. Analyse de la zone d'atomisation	139
7.2.4. Performances	143
<b>7.3. Validation expérimentale</b>	<b>144</b>
<b>7.4. Perspectives</b>	<b>145</b>
7.4.1. Couplage général SPS-DPS	145
7.4.2. Densité d'aire interfaciale	145
7.4.3. Modélisation du différentiel de vitesse	147
7.4.4. Validation du spray	147

L'objectif de ce chapitre est de réaliser une première simulation aux grandes échelles diphasiques et turbulentes en utilisant à la fois le solveur phases séparées CHARME ([Section 3.2.2.3](#)) et le solveur phase dispersée SPIREE ([Section 3.2.3.3](#)) avec un couplage par la densité d'aire interfaciale développée dans le [Chapitre 6](#). Pour rappel, la démarche d'étude globale de cette thèse peut être résumée en plusieurs points :

1. Contexte : Dans le cadre du développement d'un moteur fusée à ergols liquides, les corrélations disponibles dans la littérature ([Chapitre 2](#)) ne donnent accès qu'à des grandeurs globales de l'écoulement. La simulation numérique ([Chapitre 3](#)) est un outil qui permet



d'avoir une compréhension locale des phénomènes en jeux, et en particulier celui d'intérêt de cette thèse, l'atomisation.

2. Problématique : La plus grande difficulté pour la simulation d'un jet atomisant réside dans l'échelle des plus petites structures liquides créées, qui est a priori inconnue et peut être plus petite que l'échelle de Kolmogorov. S'il est possible de résoudre une grande partie des échelles diphasiques sur une configuration précise ([Chapitre 4](#)), les coûts de calcul sont trop importants pour que cette solution soit envisagée dans un contexte industriel.
3. Solution existante : Une solution plus pragmatique est de ne résoudre que les grandes échelles diphasiques et de modéliser les plus petites. Dans le code CEDRE de l'ONERA, lors du transfert entre le solveur phases séparées CHARME simulant les grandes échelles diphasiques et le solveur phase dispersée SPIREE, les propriétés des gouttes atomisées doivent être modélisées. La modélisation avant cette thèse ([Section 3.2.4.1](#)) faisait l'hypothèse forte que la taille des gouttes atomisées était uniforme dans le domaine de calcul et constante dans le temps.
4. Solution développée : Afin de s'affranchir de cette hypothèse forte, la solution étudiée dans cette thèse est d'utiliser une modélisation de la densité d'aire interfaciale ([Chapitre 6](#)) pour calculer une taille de goutte dépendant des conditions locales de l'écoulement.
5. Bilan : L'écoulement diphasique est résolu jusqu'à une échelle déterminée dans le [Chapitre 5](#) et, aux endroits où le maillage n'est plus suffisant, le spray est modélisé sous forme de gouttes dont la taille est calculée en fonction des conditions locales de l'écoulement. Ainsi, tout le spectre diphasique est simulé sans imposer aucune de ses caractéristiques.

## 7.1. Couplage CHARME-SPIREE

Cette partie est consacrée aux changements apportés au couplage entre CHARME et SPIREE par la modélisation de la taille des gouttes atomisées avec la densité d'aire interfaciale. Le modèle d'atomisation a été détaillé dans la [Section 3.2.4.1](#), et l'apport de cette thèse consiste à passer d'une taille de goutte atomisée moyenne uniforme et constante, comme représentée sur la [Figure 3.15](#) (a) à une taille moyenne dynamique comme illustrée sur la [Figure 3.15](#) (c). La température et la vitesse des gouttes atomisées sont inchangées et prises comme les valeurs locales du SPS. La taille des gouttes atomisées est quant à elle calculée à partir de l'[Equation 6.2](#). Cette différence entraîne une modification du terme source  $P_{MA}^{(k)}$  de l'[Equation 3.157](#) qui peut être non nul pour toutes les sections  $k$ . Deux possibilités sont envisagées pour sélectionner la section où sont atomisées les gouttes de taille  $d_{\text{atom}}$ . La méthode la plus simple consiste à comparer  $d_{\text{atom}}$  aux bornes de chaque section et à atomiser dans la section contenant  $d_{\text{atom}}$  :

$$P_{MA}^{(k)} = \begin{cases} -S_{MA}^l & \text{si } d_{\text{atom}} \in [d_{\text{inf}}^{(k)}, d_{\text{sup}}^{(k)}] , \\ 0 & \text{sinon ,} \end{cases} \quad (7.1)$$

et si  $d_{\text{atom}} > d_{\text{sup}}^{(N_{\text{cl}})}$  :

$$\begin{cases} P_{MA}^{(N_{\text{cl}})} = -S_{MA}^l , \\ P_{MA}^{(k)} = 0 & \forall k \in [1, N_{\text{cl}}] . \end{cases} \quad (7.2)$$

La seconde méthode consiste à comparer le diamètre d'atomisation au diamètre moyen des gouttes de la section  $k$  calculé par :

$$d_{\text{moy}}^{(k)} = \left( \frac{6\alpha^{(k)}}{\pi n^{(k)}} \right)^{1/3} , \quad (7.3)$$

avec  $\alpha^{(k)}$  la fraction volumique de gouttes et  $n^{(k)}$  la densité numérique de gouttes de la section  $k$ . On affecte ensuite le terme source  $S_{MA}^l$  à la section minimisant la distance entre  $d_{\text{atom}}$  et  $d_{\text{moy}}$ <sup>1</sup> :

$$P_{MA}^{(k)} = \begin{cases} -S_{MA}^l & \text{si } |d_{\text{atom}} - d_{\text{moy}}^{(k)}| < |d_{\text{atom}} - d_{\text{moy}}^{(i)}| \forall i \neq k \in [1, N_{\text{cl}}] , \\ 0 & \text{sinon .} \end{cases} \quad (7.4)$$

Pour déterminer quel est le choix le plus pertinent, on se propose d'étudier un cas limite sur un exemple donné dans le [Tableau 7.1](#). On considère une méthode sectionnelle à 2 sections avec un  $d_{\text{moy}}$  pris volontairement proche des bornes des sections. On peut ainsi trouver une taille  $d_{\text{atom}}$  qui ne donne pas une atomisation dans la même section suivant la méthode choisie. Les propriétés des gouttes étant uniques par section, la dynamique et la thermique des gouttes correspondent à une goutte ayant la taille moyenne de la section. Il apparaît ainsi évident que la deuxième méthode est plus adaptée pour choisir la section d'atomisation car elle permet de minimiser l'erreur due à la discrétisation de l'espace des tailles, en donnant aux gouttes atomisées les propriétés les plus proches de leur taille  $d_{\text{atom}}$ .

sections ( $\mu m$ )	[100, 500[	[500, 1000[
$d_{\text{moy}}$ ( $\mu m$ )	101	501
$d_{\text{atom}}$ ( $\mu m$ )	400	
Affectation section méthode 1	[100, 500[	
Affectation section méthode 2	[500, 1000[	

TABLE 7.1. – Exemple d'évaluation de la section d'atomisation pour la méthode sectionnelle

## 7.2. Application du couplage sur un cas pratique

### 7.2.1. Configuration d'étude

Le couplage présenté dans la [Section 7.1](#) est appliqué sur une configuration étudiée tout au long de ce manuscrit et détaillée dans la [Section 4.2](#). Le maillage LES-M9 introduit dans la [Section 6.2.1](#) est sélectionné pour effectuer le calcul pour deux raisons principales :

- Le modèle de densité d'aire interfaciale a été validé sur ce maillage, le diamètre d'atomisation calculé a déjà été validé.
- L'ajout du solveur phase dispersée entraîne un coût de calcul supplémentaire important. Un maillage de 9 millions de cellules permet de réaliser un premier calcul en un temps raisonnable.

Le solveur phases séparées utilise les mêmes paramètres numériques que ceux utilisés dans le [Chapitre 5](#) et le [Chapitre 6](#) donnés dans le [Tableau 5.1](#). Les paramètres numériques du solveur phase dispersée SPIREE sont donnés dans le [Tableau 7.2](#). On distingue notamment un couplage *two-way* entre le SPS et le DPS par les termes d'atomisation primaire et de pseudo-coalescence mais aussi par la modélisation du diamètre d'atomisation au travers de la densité d'aire interfaciale. L'espace des tailles est discrétisé en 4 sections afin de limiter le coût de calcul de la simulation. Deux contraintes s'appliquent pour estimer les bornes de chacune des sections. La première est donnée par l'échelle de coupure diphasique du SPS déterminée dans le [Chapitre 5](#) à  $5\Delta$ . La [Figure 6.4](#) montre que la taille moyenne des cellules dans la zone d'atomisation est de

1. Le diamètre d'atomisation  $d_{\text{atom}}$ , qui est un diamètre de Sauter ( $d_{32}$ ), est comparé au diamètre moyen des sections de la méthode sectionnelle qui est équivalent à un  $d_{30}$ . Cette comparaison n'est valable que si la distribution en taille (ici d'atomisation) dans la maille est un dirac, dans le cas contraire on a  $d_{30} \neq d_{32}$ .

$\Delta = 0.4 \delta_{lip}$  donnant ainsi une échelle de coupure à  $2 \delta_{lip}$ . La seconde est fournie par la distribution en taille de la DNS de référence donnée sur la Figure 4.10. On peut ainsi choisir les bornes des sections pour discrétiser au mieux l'espace des tailles de la DNS et prendre la borne inférieure de la dernière section au plus proche de l'échelle de coupure. Enfin, le CFL est très légèrement réduit (de 1.4 à 1.3) pour conserver la stabilité du système.

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Méthode sectionnelle avec reconstruction affine               <ul style="list-style-type: none"> <li>• 4 sections d'intervalles de diamètre (en <math>\delta_{lip}</math>) <math>I_S^{(1)} = [0; 0.25[</math>, <math>I_S^{(2)} = [0.25; 0.75[</math>, <math>I_S^{(3)} = [0.75; 1.5[</math> et <math>I_S^{(4)} = [1.5; +\infty[</math></li> </ul> </li> </ul>
Modèles physiques	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Taille minimale des gouttes : <math>1 \delta_{lip}</math></li> <li>• Atomisation primaire : <math>u_{atom} = u^{SPS}</math>, <math>T_{atom} = T^{SPS}</math> et <math>d_{atom} = 6\alpha_l^{SPS} / \Sigma^{SPS}</math> avec <math>\Sigma^{SPS}</math> transporté.</li> <li>• Pseudo-coalescence (terme du DPS vers le SPS)</li> <li>• Fragmentation (interaction entre les sections)</li> </ul>
Discrétisation spatiale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Méthode MUSCL multipente d'ordre 2 avec limiteur hybride</li> <li>• Schéma de Godunov</li> </ul>
Intégration temporelle	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Splitting de Strang (ordre 2)</li> <li>• Schéma explicite RK2 pour le transport</li> <li>• Schéma Euler explicite pour les termes sources de couplage avec 4 itérations de relaxation</li> <li>• Pas de temps identique au DPS piloté par CFL = 1.3</li> </ul>

TABLE 7.2. – Paramètres numériques et modèles du solveur DPS

Le calcul est réalisé sur environ 50 ms de temps physique pour évaluer le comportement du DPS lorsqu'il est couplé avec le modèle de densité d'aire interfaciale. L'objectif est de tirer les premières conclusions sur cette modélisation afin de proposer des perspectives d'amélioration pour le futur.

### 7.2.2. Quantités globales

Dans un premier temps, on essaye de créer une représentation du spray LES cohérente avec les observations réalisées tout au long de ce manuscrit. En particulier, on s'attache à essayer de représenter les structures liquides diffuses par l'ensemble de leurs fractions volumiques pour rester cohérent avec la détermination des échelles de coupure du Chapitre 5. Pour cela le *volume rendering* de Paraview permet de donner une représentation continue de la fraction volumique de liquide et est donné sur la Figure 7.1 pour un instantané. Les fractions volumiques les plus élevées correspondent aux couleurs les plus claires (jaune) et les fractions volumiques les plus faibles sont représentées par les couleurs les plus foncées (violet) de manière identique à la Figure 6.5. On peut ainsi observer l'atomisation du cœur liquide et des ligaments attachés, ainsi que des structures atomisées qui comportent uniquement des fractions volumiques faibles car le maillage est progressivement dé-raffiné en aval. Le rendu de la scène est réalisé par du *ray-tracing*, permettant de rendre réaliste le fond de chambre où quelques structures liquides sont observées<sup>2</sup>.

La Figure 7.2 ajoute la représentation de la phase dispersée sur le même instant que la Figure 7.1. La représentation intuitive discrète (lagrangienne) d'un spray de gouttes étant difficile

2. Ces structures liquides sont issues de liquide diffus piégé dans la recirculation toroïdale et aggloméré de manière artificielle par le limiteur compressif du SPS. Ces structures liquides peuvent être observées après un temps physique de calcul important pour des simulations inertes.

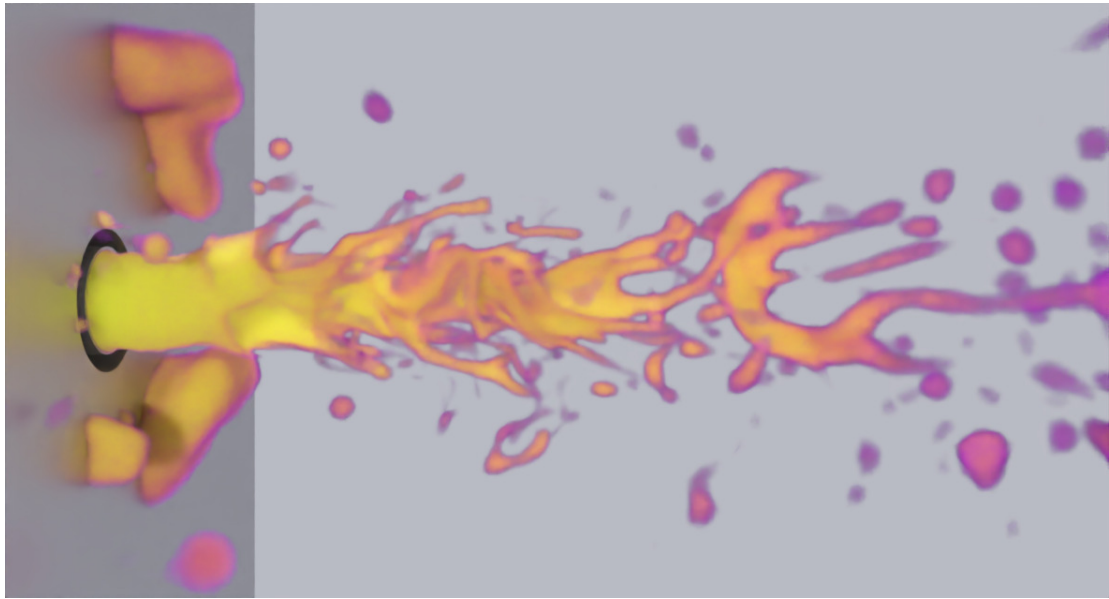


FIGURE 7.1. – Représentation du champ instantané de fraction volumique de liquide du SPS

à obtenir du fait de la formulation eulérienne du DPS<sup>3</sup> choisi, on décide de le représenter par un brouillard avec la même technique de *volume rendering*. Les zones comportant une fraction volumique de gouttes élevée sont représentées par une opacité plus importante, et les zones comportant une fraction volumique de gouttes faible par un brouillard plus diffus. Ainsi, malgré une modélisation à interface diffuse qui peut être non intuitive au premier abord, on aboutit à une représentation satisfaisante pour à la fois des grandes structures diphasiques mais aussi des plus petites simulées par le DPS.

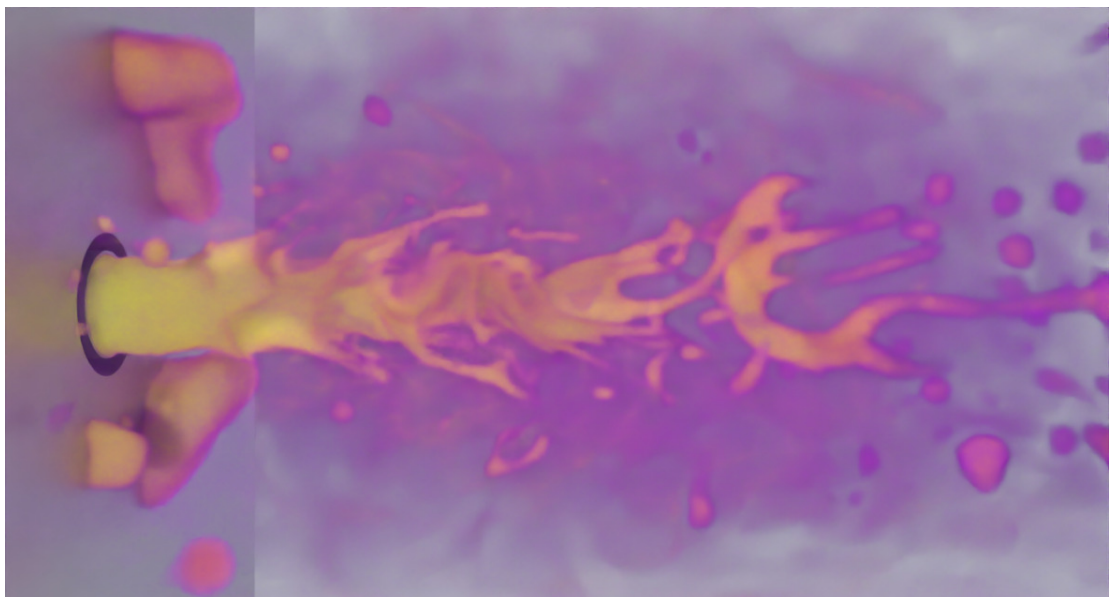


FIGURE 7.2. – Représentation du champ instantané de fraction volumique de liquide du SPS et de la fraction volumique de gouttes du DPS par volume rendering

Le régime transitoire du SPS et du modèle de densité d'aire interfaciale a déjà été effectué avant le couplage avec le DPS. On se focalise donc uniquement sur le régime transitoire du DPS.

3. On pourrait éventuellement déterminer un nombre de gouttes par cellules et les représenter comme des sphères par leur  $d_{moy}$ . Cependant, en pratique, le nombre de gouttes déterminé peut être une valeur non entière inférieure à l'unité.

Pour cela on étudie les quantités globales du DPS intégrées sur tout le domaine. Une quantité d'intérêt est le terme source de couplage massique entre le SPS et le DPS  $P_M^{(k)} = P_{MA}^{(k)} - P_{MC}^{(k)}$ .

La Figure 7.3 trace l'évolution de l'intégrale du terme source d'atomisation  $P_{MA}$  pour chacune des sections dont les bornes ont été définies dans le Tableau 7.2. La première remarque est que, par la modélisation d'une taille de goutte locale, le débit d'atomisation est non nul dans toutes les sections mais est aussi très différent et n'est pas ordonné par taille ( $P_{MA}^{(4)} < P_{MA}^{(3)} < P_{MA}^{(1)} < P_{MA}^{(2)}$ ). Ceci montre tout l'intérêt de ne pas imposer  $d_{\text{atom}}$  mais de le calculer à partir des quantités locales de l'écoulement. On observe aussi que le régime transitoire n'est toujours pas passé malgré un temps physique calculé relativement long. Des explications et un correctif possible sont détaillés dans la Section 7.4.1.

La Figure 7.4 donne l'évolution temporelle de l'intégrale du débit de pseudo-coalescence. De manière évidente, la pseudo-coalescence suit une évolution opposée au débit d'atomisation primaire. Les sections ayant un débit d'atomisation élevé ont plus de chance de venir impacter la zone dense du liquide et être transférée vers le SPS par le terme de coalescence.

Enfin, l'évolution du terme source de masse entre le SPS et le DPS est tracée sur la Figure 7.5. On remarque que les débits dans la zone d'atomisation sont beaucoup plus faibles que pour les débits intégrés sur tout le domaine, notamment pour les sections 3 et 4 où ils sont quasiment nuls. De plus, le débit total  $P_M^{(k)}$  de toutes les sections est très faible malgré un débit d'atomisation qui peut être important, notamment pour la première section. Ceci montre qu'une grande partie de la masse de gouttes atomisées finit par être renvoyée vers le SPS par le terme de pseudo-coalescence. Une explication probable de l'activation importante du terme de pseudo-coalescence vient du choix d'une configuration inerte avec une modélisation à interface diffuse. On observe ainsi beaucoup de liquide diffus dans tout le domaine qui crée une zone dense pour le terme de coalescence et force le transfert du DPS vers le SPS. Une solution potentielle à cette problématique est abordée dans la Section 7.4.1.

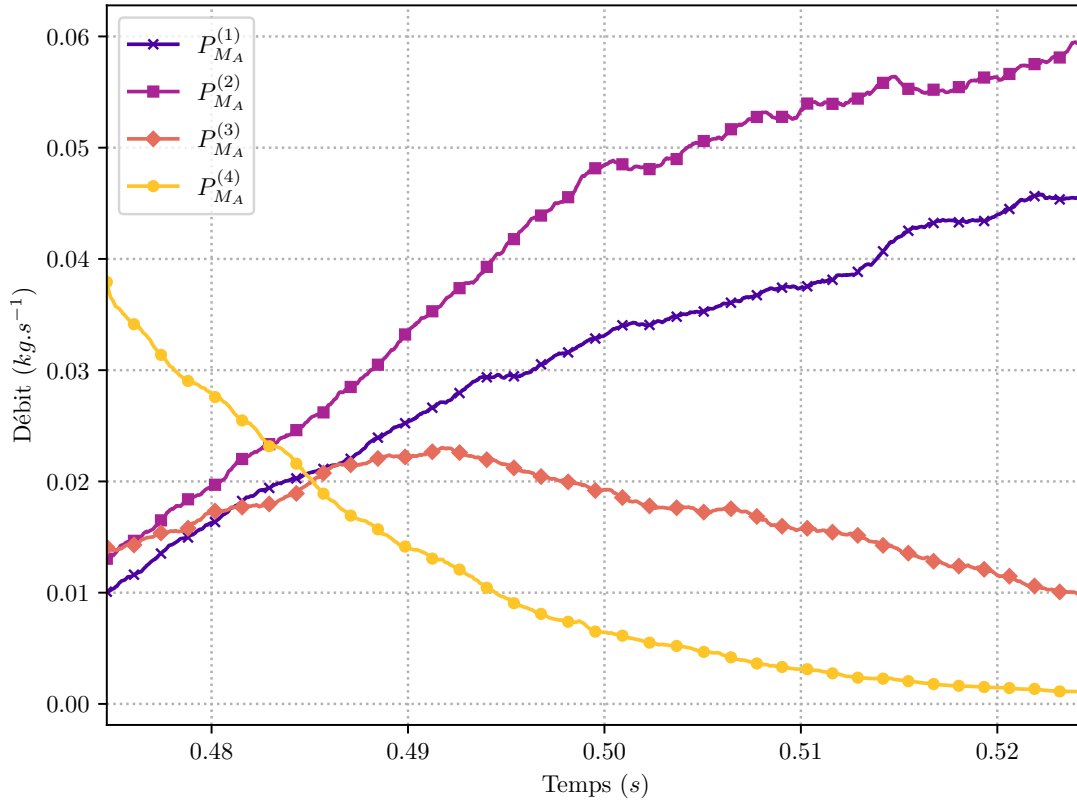


FIGURE 7.3. – Intégrale du débit d'atomisation dans le domaine pour les sections  $I_S^{(1)}$  à  $I_S^{(4)}$

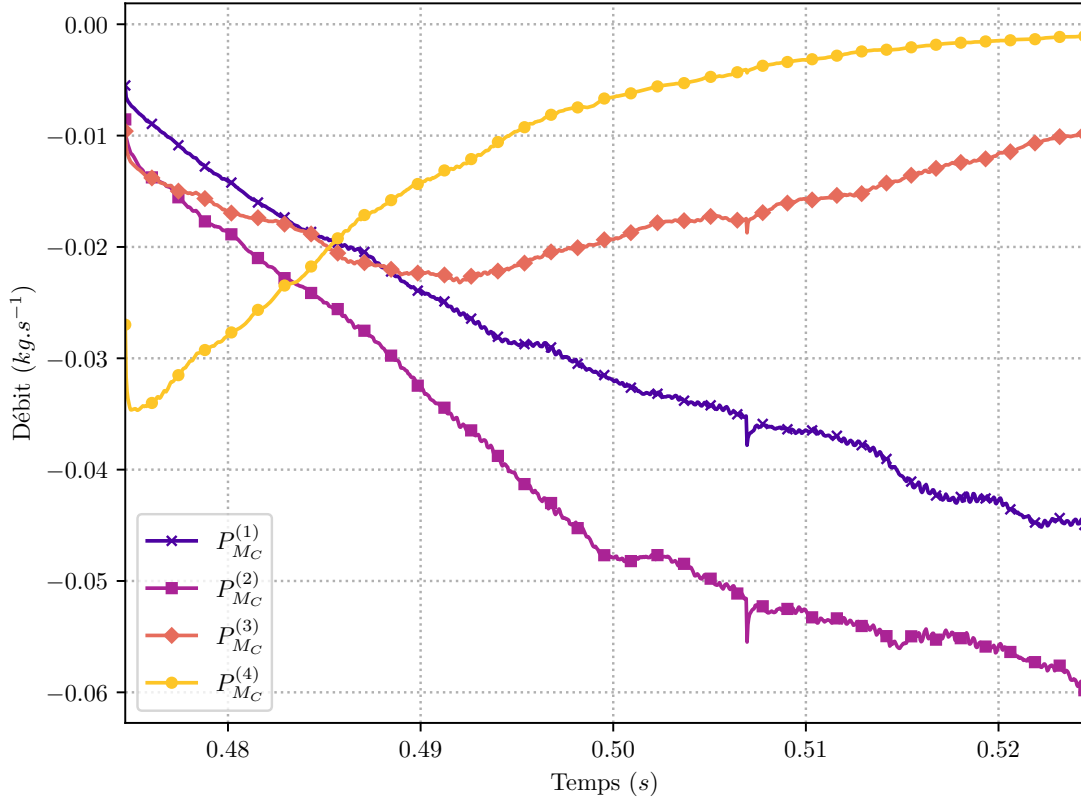


FIGURE 7.4. – Intégrale du débit de pseudo-coalescence dans le domaine pour les sections  $I_S^{(1)}$  à  $I_S^{(4)}$

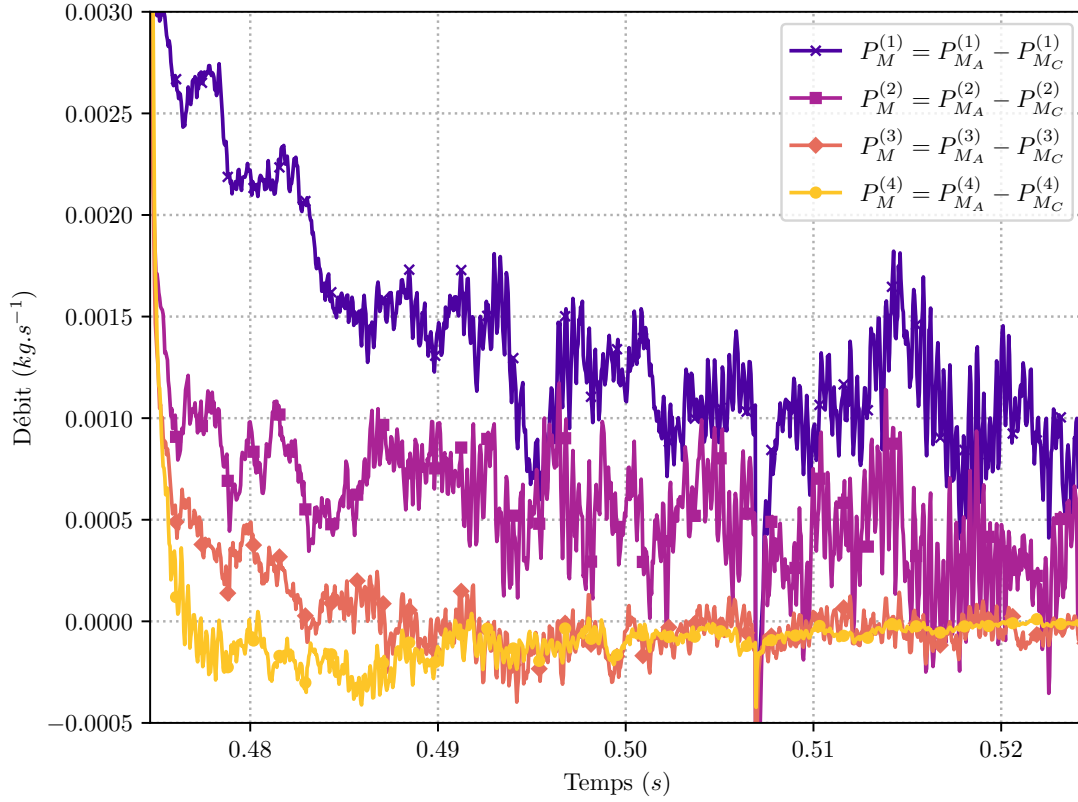
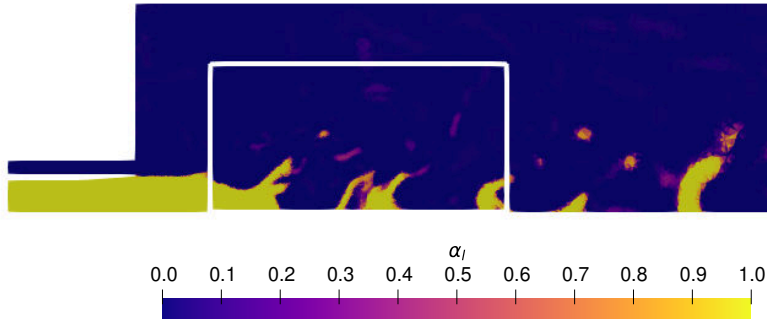
### 7.2.3. Analyse de la zone d'atomisation

Afin de caractériser l'impact de la modélisation de la taille des gouttes atomisées on isole la zone comprise entre  $x = 1.5 D_1$  et  $r = 0.2 D_1$  identifiée comme la zone d'atomisation principale où le modèle de densité d'aire interfaciale s'active. Un champ instantané de fraction volumique de liquide ainsi que la zone d'atomisation, positionnée par un rectangle blanc, sont indiqués sur la Figure 7.6. Les champs de densité d'aire interfaciale, de débit d'atomisation par section et de fraction volumique de gouttes par section du même instant sont donnés en annexe B pour ne pas alourdir les résultats donnés dans les pages suivantes.

On trace l'évolution des quantités d'intérêt liées au couplage entre le SPS et le DPS par la densité d'aire interfaciale dans la zone d'atomisation identifiée où le modèle a été validé dans le Chapitre 6. La première quantité est l'évolution temporelle du débit d'atomisation par section tracée sur la Figure 7.7, où l'on observe que le débit d'atomisation de la section 1 est supérieur à celui de la section 2 contrairement aux débits d'atomisation de ces sections dans tout le domaine. De manière identique aux débits d'atomisation dans l'ensemble du domaine, on peut observer que les débits des sections 3 et 4 sont très faibles par rapport à ceux des sections 1 et 2. Ceci indique que la masse atomisée par les plus grosses gouttes (sections 3 et 4) est faible en comparaison aux plus petites gouttes (sections 1 et 2). Le débit de coalescence dans la zone d'atomisation tracé sur la Figure 7.8 suit une évolution similaire au débit d'atomisation comme dans le domaine global. Enfin, l'intégrale du terme source de couplage dans la zone d'atomisation tracé sur la Figure 7.9 est très similaire de celui du domaine global, indiquant que la majorité de l'atomisation se situe dans la zone qui a été identifiée.

Pour étudier l'impact de la modélisation de la taille des structures atomisées par la densité d'aire interfaciale, on commence par identifier une taille caractéristique des structures atomisées. Pour cela la taille moyenne des gouttes atomisées est calculée uniquement sur les cellules de la




 FIGURE 7.5. – Intégrale du terme de couplage massique  $P_M$  pour les sections  $I_S^{(1)}$  à  $I_S^{(4)}$ 

 FIGURE 7.6. – Champ de fraction volumique de liquide  $\alpha_l$  instantané de la simulation avec couplage CHARME-SPIREE par la densité d'aire interfaciale. La zone d'atomisation est indiquée par un rectangle blanc.

zone d'atomisation comportant un débit d'atomisation non nul et est pondérée par le débit d'atomisation de la cellule ( $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ) ainsi que par le volume de la cellule afin d'être représentatif du spray local. Le diamètre d'atomisation moyen pondéré par le débit d'atomisation et le volume de la cellule  $\langle d_{atom} \rangle$  est donné par :

$$\langle d_{atom} \rangle = \frac{\sum_i V_{cell}(i) \times \left( \sum_k P_{MA}^{(k)}(i) \right) \times d_{atom}(i)}{\sum_i V_{cell}(i) \times \left( \sum_k P_{MA}^{(k)}(i) \right)}, \quad (7.5)$$

avec  $V_{cell}(i)$  le volume de la cellule  $i$ . L'évolution temporelle de la taille de goutte moyenne est

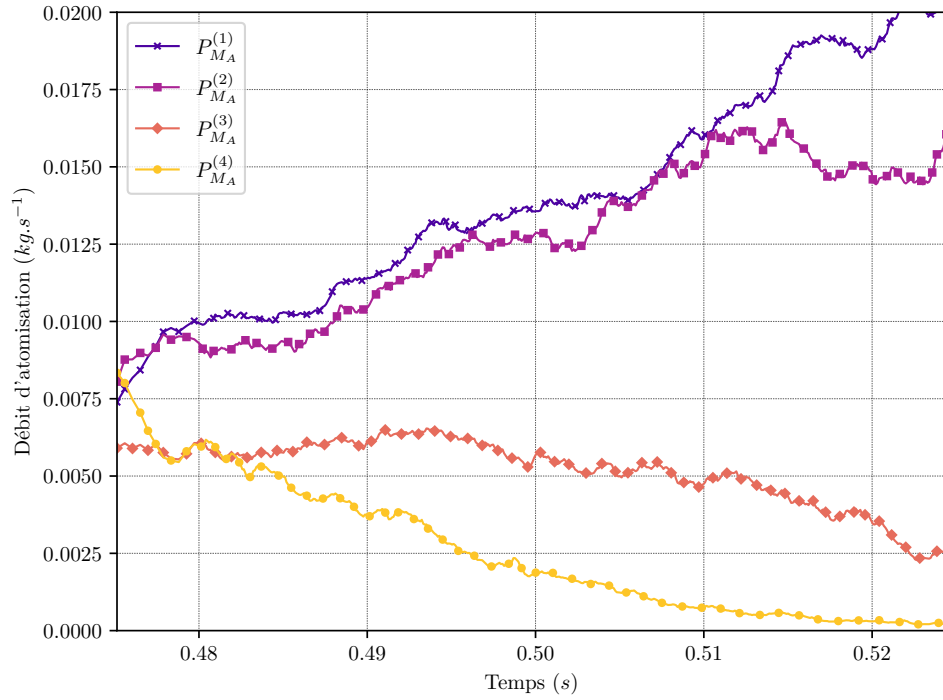


FIGURE 7.7. – Évolution temporelle du débit d'atomisation par section dans la zone d'atomisation

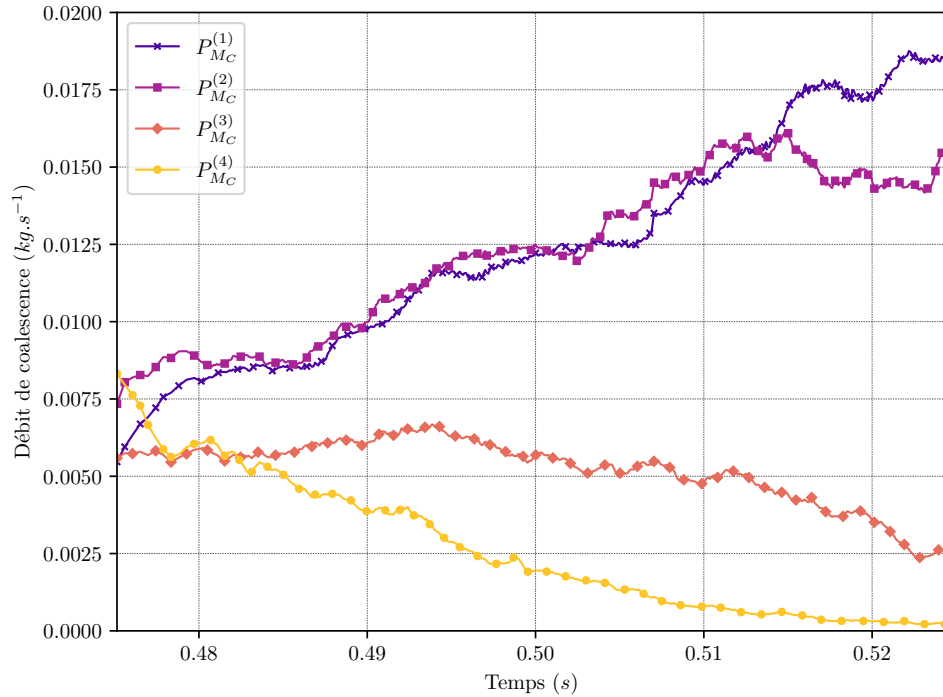


FIGURE 7.8. – Évolution temporelle du débit de coalescence par section dans la zone d'atomisation

donnée sur la Figure 7.10. Le régime transitoire n'est pas encore passé mais  $\langle d_{\text{atom}} \rangle$  semble tendre vers  $0.25 \delta_{\text{lip}}$ . On peut remarquer que cette échelle d'atomisation est proche de la valeur maximale de la PDF de la DNS-M1 (Figure 4.10).

Cependant, une taille moyenne de gouttes atomisée ne donne qu'une indication partielle sur



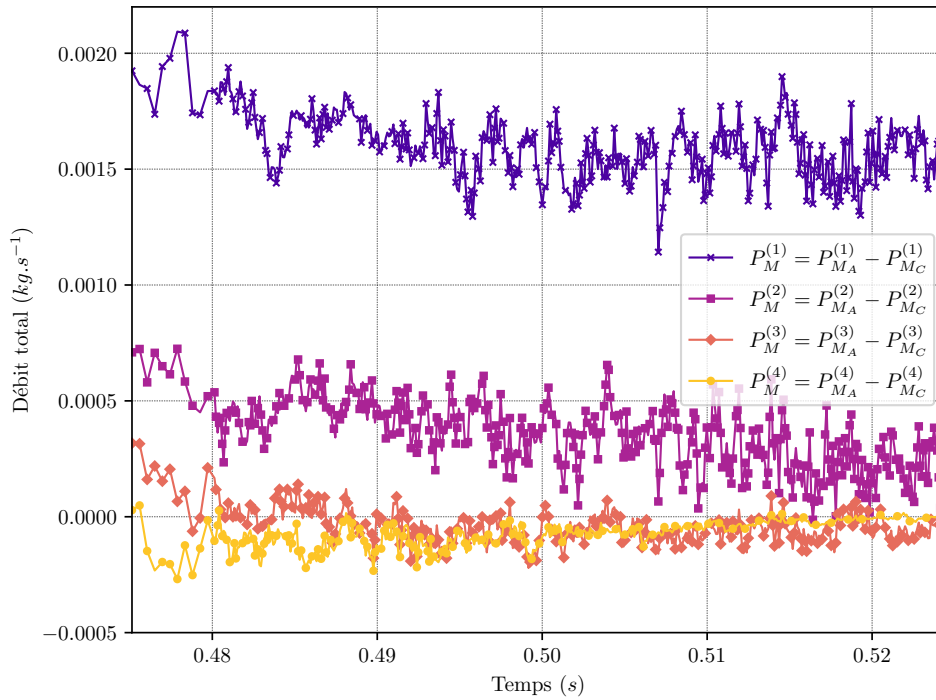


FIGURE 7.9. – Évolution temporelle du terme de couplage  $P_M$  par section dans la zone d'atomisation

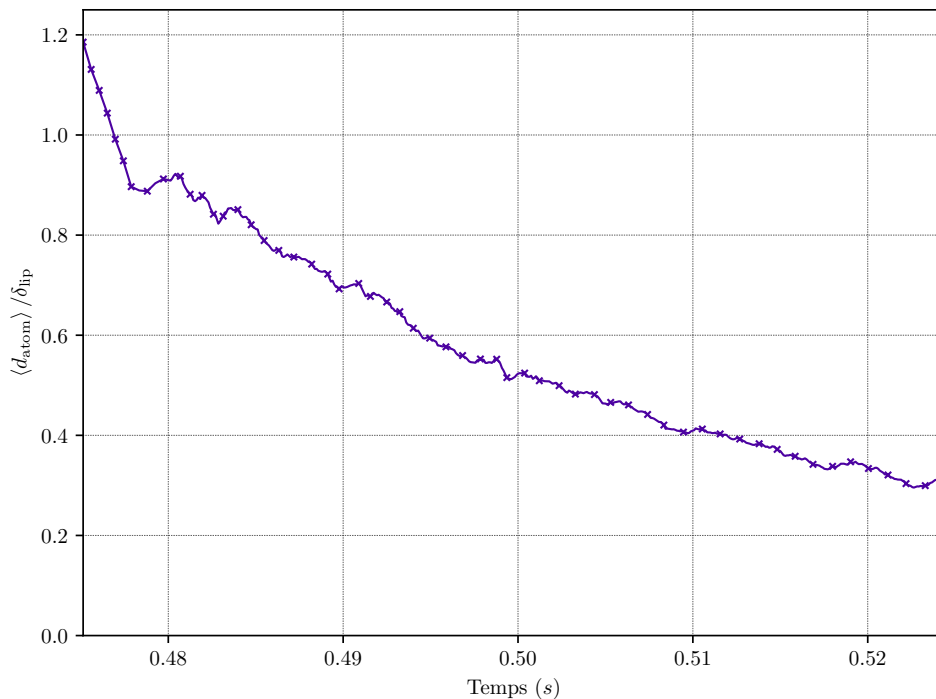


FIGURE 7.10. – Évolution temporelle de la taille moyenne des gouttes atomisées dans la zone d'atomisation

la modélisation locale de la taille de goutte atomisée. Pour finir, on se propose de donner la répartition de taille des gouttes atomisées dans la zone d'atomisation. De manière similaire à l'Equation 7.5, le noyau de la PDF de taille d'atomisation est pondéré par le débit d'atomisation et le volume d'atomisation :

$$f_{h_{\text{liss}}}(d_{\text{atom}}) = \frac{1}{h_{\text{liss}} \sum_i V_{\text{cell}}(i) \times \left( \sum_k P_{MA}^{(k)}(i) \right)} \sum_i V_{\text{cell}}(i) \times \left( \sum_k P_{MA}^{(k)}(i) \right) \times K_{\text{PDF}} \left( \frac{d_{\text{atom}} - d_i}{h_{\text{liss}}} \right). \quad (7.6)$$

Par un raisonnement identique à celui de la [Section 4.4.2.2](#), le pas de discrétisation de la PDF et  $h_{\text{liss}}$  sont choisis pour obtenir une PDF de taille de gouttes atomisées qui est adapté aux échelles étudiées. Le DPS peut modéliser des gouttes de très petite taille, bien inférieure à la taille de maille locale LES-M9 mais aussi à celle de la simulation DNS-M1.

Le noyau est pris gaussien et donné dans l'[Equation 4.15](#). Le spectre des tailles est discrétisé avec un pas de  $1/340 \Delta_{\text{DNS-M1}}$  et le paramètre  $h_{\text{liss}} = 0.002 \Delta_{\text{DNS-M1}}$ . Ces valeurs sont donc significativement plus faibles que les valeurs choisies pour la DNS dans la [Section 4.4.2.2](#) et pour la simulation des grandes échelles de l'atomisation dans le [Paragraphe 5.2.1.2](#). Contrairement à l'[Equation 4.14](#), ici l'indice  $i$  parcourt l'ensemble des cellules de la zone identifiée dont le débit d'atomisation est non nul. En pratique cela correspond à environ 4M de cellules contre les  $\sim 15k$  gouttes étudiées pour la DNS<sup>4</sup>

Le régime transitoire n'étant pas évacué, la [Figure 7.11 \(b\)](#) ne donne que la PDF du dernier instant simulé. Pour comparaison<sup>5</sup> la PDF de l'écoulement global de la DNS-M1 est aussi tracée sur la [Figure 7.11 \(a\)](#). On peut observer que la valeur moyenne de  $d_{\text{atom}}$  tracée sur la [Figure 7.10](#) correspond à la valeur maximale de la PDF et est très proche de celle de la DNS. L'étalement de la PDF du diamètre d'atomisation autour de sa valeur maximale est beaucoup plus important que celui de la PDF DNS-M1. En observant cette différence pour  $d < 0.5 \delta_{\text{lip}}$  on remarque que l'on modélise un plus grand nombre de gouttes de petite taille que sur la DNS. En effet, ceci est rendu possible car la taille limite de goutte du DPS est la seule limitation contrairement au maillage sur la DNS. Pour comparer les PDFs aux grands diamètres ( $d > 0.5 \delta_{\text{lip}}$ ) on s'intéresse au rapport entre la valeur maximale de la PDF et sa valeur à  $3 \delta_{\text{lip}}$ . Ce rapport est égal à 4 pour la PDF d'atomisation LES et est supérieur à 10 pour la DNS, indiquant que le modèle de densité d'aire interfaciale tend à créer une plus grande proportion de grosses gouttes que le spray de la DNS. Ceci signifie que les gouttes atomisées du SPS au DPS ne sont pas encore à l'équilibre, et vont se fragmenter dans le DPS. On pourrait vérifier cette hypothèse en comparant la PDF des diamètres d'atomisation à la PDF du spray DPS.

#### 7.2.4. Performances

Après avoir analysé les résultats préliminaires du couplage entre le SPS et le DPS par la densité d'aire interfaciale pour l'estimation locale de la taille des gouttes atomisées, cette section s'intéresse au coût de calcul de la méthode utilisée.

On réalise une étude comparative entre la simulation DNS-M1 qui a servi de référence tout au long du manuscrit et des calculs LES avec :

- le SPS (CHARME) seul,
- le SPS auquel on ajoute l'équation de transport de la densité d'aire interfaciale  $\Sigma$ ,
- toutes les échelles du spray simulées, avec le SPS, le DPS (SPIREE) et un couplage par l'équation de transport de la densité d'aire interfaciale.

L'étude consiste à comparer le nombre d'heures CPU pour simuler 70 ms de physique correspondant approximativement au temps simulé sur la DNS-M1 pour passer le transitoire et faire converger les statistiques du spray. Le [Tableau 7.3](#) résume tous les paramètres des simulations considérées, dont : le nombre de mailles, le nombre de cœurs utilisés, le temps CPU par itération

4. La considération eulérienne du spray entraîne ainsi un coût de calcul beaucoup plus conséquent pour l'estimation de la PDF que pour les données lagrangiennes du spray DNS obtenues par l'outil AlgoDetect.

5. La comparaison reste cependant limitée car il faudrait avoir des données moyennées temporellement pour pouvoir pleinement analyser les PDFs.

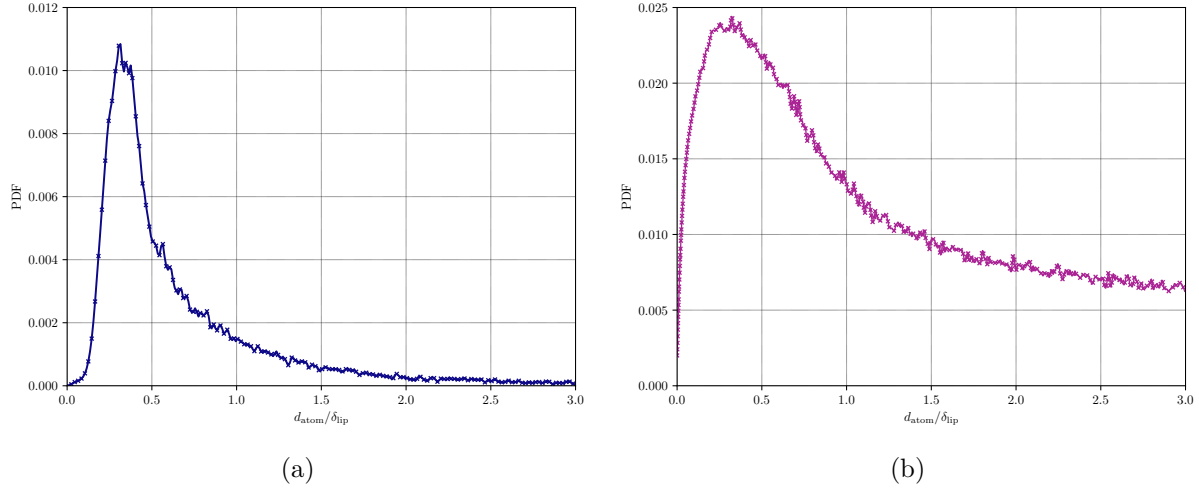


FIGURE 7.11. – (a) PDF globale moyenne de taille de goutte de la DNS-M1 et (b) PDF instantanée de taille de gouttes atomisées dans la zone d'atomisation

et le pas de temps de la simulation. À partir de ces données, le nombre d'itérations requises pour simuler les 70 ms de temps physique est estimé ainsi que le coût de calcul CPU. Ainsi, une simulation DNS de l'écoulement étudié tout au long de cette thèse sur un maillage de près de 3 milliards de points avec le code DyJeAT nécessite 23M d'heures CPU. Le même calcul de toutes les échelles du spray (avec une échelle de coupure plus petite que la DNS) avec la stratégie SPS, DPS couplés par une équation de densité d'aire interfaciale nécessite environ 30 fois moins d'heures CPU. On met ainsi en évidence tout l'intérêt de la modélisation proposée pour simuler un jet atomisant impliquant une grande variété d'échelles diphasiques. Il faut tout de même noter que le coût de calcul reste important dans un contexte industriel notamment pour une simulation réactive impliquant plusieurs espèces dans la phase gazeuse et augmentant le nombre d'équations proportionnellement.

	DNS	SPS	SPS + $\Sigma$	SPS + $\Sigma$ + DPS
Nombre de mailles	2.8G	9M	9M	9M
Nombre de cœurs	43200	960	960	1920
$t_{\text{CPU/it}}$ (s)	$\sim 5.63$	$\sim 0.261$	$\sim 0.397$	$\sim 0.85$
$dt$ (s)	$\sim 2.0 \times 10^{-7}$	$\sim 4.6 \times 10^{-8}$	$\sim 4.6 \times 10^{-8}$	$\sim 4.28 \times 10^{-8}$
Temps physique simulé (ms)	70			
Nombre d'itérations requises	350k	1.5M	1.5M	1.6M
Coût calcul (h CPU)	23M	104k	160k	725k

TABLE 7.3. – Comparatif coût de calcul spray DNS et LES

### 7.3. Validation expérimentale

L'analyse du spray LES réalisée dans ce chapitre met en évidence une grande variété d'échelles dont certaines qui sont plus petites que la taille de maille  $\Delta_{\text{DNS-M1}}$ . La validation du spray global

et en particulier de ces échelles est complexe et peut être réalisée par des comparaisons à des mesures expérimentales. Durant cette thèse, des travaux ont été menés en ce sens pour estimer des tailles de gouttes sur les images expérimentales de l'expérience de [Ficuciello \*et al.\* \[2017\]](#). Les résultats des outils créés n'ayant pas été utilisés dans cette thèse, on mentionne juste leur fonctionnalité pour une validation future du spray. Le fonctionnement du premier outil permet :

1. La détection des gouttes sphériques présentes sur l'image d'ombroscopie.
2. Le suivi sur plusieurs images des gouttes précédemment détectées.
3. La mesure de la taille de goutte sur plusieurs instants avec correction du flou de [Fdida et Blaisot \[2010\]](#).
4. La mesure de la vitesse des gouttes grâce à leur suivi temporel.
5. La création de statistiques sur la taille et la vitesse des gouttes.

Afin d'étudier les structures liquides non sphériques de l'écoulement, un outil couplant des techniques de deep learning et de simulations haute fidélité a aussi été développé et présenté à la conférence EUCASS 2023. L'article associé est donné en [annexe C](#).

## 7.4. Perspectives

Les travaux réalisés dans cette thèse permettent d'envisager plusieurs perspectives pour la simulation de jets atomisants et leur validation.

### 7.4.1. Couplage général SPS-DPS

Comme observé dans la [Section 7.2.2](#) et la [Section 7.2.3](#) le régime transitoire du couplage entre le SPS et le DPS est très long. Le calcul a été effectué sur quasiment 70 ms de temps physique correspondant au temps nécessaire pour réaliser une simulation complète (transitoire et convergence des moyennes) dans la [Section 7.2.4](#) sans pour autant réussir à passer le régime transitoire. Cette observation peut être expliquée par la formulation du terme source d'atomisation donné par l'[Equation 3.153](#) et en particulier le temps caractéristique associé. Ce dernier est défini pour l'instant par l'[Equation 3.154](#) correspondant à une fréquence turbulente. Cependant, le [Chapitre 6](#) a permis de montrer que dans le cas d'une atomisation assistée, la création d'interface n'est pas pilotée par la turbulence mais par le différentiel de vitesse entre le liquide et le gaz. Le temps caractéristique de production d'interface est défini alors par l'[Equation 6.24](#) et l'[Equation 6.25](#). Ainsi, il semble naturel de formuler le terme fréquentiel d'atomisation en fonction du phénomène d'atomisation prédominant comme suit :

$$f_A = \max \{ f_{\text{turb}}, f_{\text{cis}} \} . \quad (7.7)$$

Il faut cependant noter que la formulation de  $f_{\text{cis}}$  dépend du différentiel de vitesse estimé dans la [Section 6.4](#). La modélisation du différentiel de vitesse est cependant valide uniquement dans la zone dense de l'interface ( $\alpha_l > 10^{-3}$ ). Cette condition s'oppose à la fonction d'efficacité du terme source d'atomisation ([Equation 3.155](#)) couplant le SPS et le DPS tracée sur la [Figure 3.14](#). Ceci met en évidence que la modélisation du différentiel de vitesse pour la modélisation du terme d'atomisation entre le SPS et le DPS est complexe.

### 7.4.2. Densité d'aire interfaciale

#### Modèle général

Dans cette thèse, et en particulier dans le [Chapitre 6](#), une modélisation de la densité d'aire interfaciale en sous-maille a été développée pour l'atomisation assistée en se basant sur des travaux de [Chesnel \*et al.\* \[2011\]](#) portant sur l'atomisation mécanique. Il a été mis en évidence que les phénomènes physiques à l'origine de la création de l'interface sont très différents de ceux rencontrés

dans une configuration à atomisation mécanique pilotée par la turbulence. Si la configuration étudiée dans cette thèse est entièrement pilotée par l'atomisation assistée, on peut imaginer qu'il existe des configurations limites où l'atomisation peut être localement mécanique ou assistée. Dans ce cadre, on peut combiner les approches développées dans cette thèse avec celle de Chesnel *et al.* [2011] pour aboutir à une formulation générale de la création de densité d'aire interfaciale. On propose de conserver la décomposition de la densité d'aire interfaciale  $\Sigma$  en une partie résolue  $\Sigma_{\text{res}}$  estimée par le gradient de la fraction volumique de liquide et une partie sous maille  $\Sigma'$ . L'équation de transport 6.15 de  $\Sigma'$  est inchangée et on prend le terme source de création d'interface comme :

$$\dot{\Sigma}_{\text{créa}} = f_{\text{interf}} \times \Sigma \times \max \left\{ \left( 1 - \frac{\Sigma}{\Sigma_{\text{cr}}} \right), 0 \right\} \times \zeta, \quad (7.8)$$

avec :

$$f_{\text{interf}} = \max \{ f_{\text{turb}}, f_{\text{cis}} \}, \quad (7.9)$$

le temps caractéristique de création d'interface pris comme celui du phénomène d'atomisation (mécanique ou assistée) prédominant<sup>6</sup>. La densité d'aire interfaciale critique  $\Sigma_{\text{cr}}$  est toujours décomposée en une partie résolue et une partie sous maille qui s'exprime cette fois-ci :

$$\Sigma'_{\text{cr}} = \begin{cases} \frac{\rho(u_g - 2u_l)^2}{\sigma \text{We}_{\text{cr,cis}}} & \text{si } f_{\text{turb}} \leq f_{\text{cis}} \\ \frac{\rho \tilde{k}}{\sigma \text{We}_{\text{cr,turb}}} & \text{si } f_{\text{turb}} > f_{\text{cis}} \end{cases}, \quad (7.10)$$

dont la formulation dépend du phénomène d'atomisation prédominant estimé par leur fréquence caractéristique respective. La définition dépend du Weber critique qui pourrait éventuellement être propre à chaque phénomène<sup>7</sup>. Enfin,  $\zeta$  est un terme spécifique à l'atomisation assistée défini par :

$$\zeta = \begin{cases} \lambda_{\text{atom}} \times \Psi & \text{si } f_{\text{turb}} \leq f_{\text{cis}} \\ 1 & \text{si } f_{\text{turb}} > f_{\text{cis}} \end{cases}, \quad (7.11)$$

où les fonctions  $\lambda_{\text{atom}}$  et  $\Psi$  ont été définies dans les sections 6.3.3 et 6.3.4 respectivement. Il est important de noter que cette modélisation générale nécessite une estimation du différentiel de vitesse entre le liquide et le gaz qui peut être complexe et lourde (Section 6.4).

### Autres utilisations de la densité d'aire interfaciale

Cette thèse s'inscrit dans une démarche d'études pour la simulation de flammes diphasiques cryogéniques. Il est important de noter que la formulation du modèle est capable de décrire toute la plage des nombres de Weber possibles, qui englobent divers régimes d'atomisation<sup>8</sup>. En particulier, on s'est intéressé à la densité d'aire interfaciale afin de calculer une taille de goutte d'atomisation lors de leur transfert du SPS vers le DPS. D'autres utilisations et couplages de la densité d'aire interfaciale sont néanmoins envisageables :

- Utilisation directe dans le SPS pour évaporer le liquide avant sa combustion. En faisant ce choix, on ne prend aucune hypothèse sur la forme des structures liquides du spray. Le coût de calcul est très largement réduit (Tableau 7.3) et on élimine un certain nombre de contraintes

6. Identique à celui proposé pour l'atomisation entre le SPS et le DPS dans la Section 7.4.1

7. En particulier le  $\text{We}_{\text{cr,turb}}$  nécessite d'être vérifié avec la nouvelle décomposition de la densité d'aire interfaciale ainsi que pour une modélisation à interface diffuse.

8. Il reste pertinent pour des régimes où le principal phénomène d'atomisation est l'atomisation texturale. Cependant, dans les régimes où l'atomisation structurale est prédominante, un modèle de sous-maille de densité d'aire interfaciale semble peu pertinent de part la taille des structures liquides en jeux.

numériques associées au DPS. Cependant, le modèle d'atomisation n'a été validé que dans la zone d'atomisation près du cœur liquide. Une validation de la modélisation dans tout le domaine nécessiterait des termes sources supplémentaires à l'équation de transport pour modéliser la destruction de densité d'aire interfaciale liée à la stabilisation des structures liquides sous forme sphérique mais aussi à l'évaporation (qui entraîne une réduction de l'aire interfaciale).

- Utilisation dans le cadre d'une nouvelle modélisation de la phase dispersée développée par Loison *et al.* [(soumis)]. Cette approche permet de modéliser la déformation de gouttes sous-maille mais aussi d'obtenir une distribution dynamique de taille représentée sur la Figure 3.15 (d). La densité d'aire interfaciale intervient alors comme un moment d'ordre 1 dans le système et sa production en sous-maille nécessite d'être modélisée.

### 7.4.3. Modélisation du différentiel de vitesse

#### Application à d'autres configurations

La modélisation du différentiel de vitesse pour la densité d'aire interfaciale a été détaillée dans la Section 6.4. Cette modélisation est assez contraignante car elle dépend de la géométrie de l'injecteur et a été appliquée pour l'instant uniquement à une injection coaxiale. L'application du modèle de densité d'aire interfaciale à d'autres configurations ou géométries d'injecteur n'est donc pas évidente et nécessite a minima une nouvelle validation du champ de vitesse de gaz non dévié ou une nouvelle modélisation. Plusieurs applications d'atomisation assistée peuvent être envisagées :

- Nappe liquide : (type *Airblast*) est très proche de l'injection coaxiale du point de vue de la modélisation de la vitesse du gaz. Des nombres de Weber critiques ont déjà été identifiés pour ce genre de configuration comme évoqué dans la Section 6.5.5.2, et l'utilisation de la modélisation de la vitesse ne pose a priori pas de difficultés particulières bien qu'il faille valider son utilisation pratique.
- *Jet in cross flow* : est assez différente puisque le jet gazeux est orthogonal à l'injection liquide. Par exemple on peut essayer de se ramener à un écoulement sur une plaque plane ou un écoulement autour d'un obstacle (cylindrique par exemple) qui semble correspondre à la vitesse du gaz perçue par le liquide lors de son atomisation. De même la validation par comparaison à une DNS de référence semble envisageable.
- Coaxial swirl : consiste à donner une vitesse transversale non nulle au fluide. La dépression générée sur l'axe modifie le profil de vitesse et nécessite une modélisation dédiée.
- Coaxial bi-liquide : ne change pas a priori la modélisation par rapport au cas diphasique étudié dans cette thèse. Néanmoins, le modèle nécessite d'être validé dans ces conditions particulières.

### 7.4.4. Validation du spray

Le spray généré par le SPS ainsi que celui modélisé par le DPS couplé par la densité d'aire interfaciale pour la taille des gouttes atomisées nécessite d'être validé notamment par les outils présentés dans la Section 7.3 sur la configuration étudiée de Ficuciello *et al.* [2017]. L'effet de l'acoustique sur le spray pourra ensuite être étudié dans le prolongement des travaux de Rutard [2019].

Enfin, il serait également intéressant de se rapprocher d'une configuration et d'un point de fonctionnement plus proche de ce que l'on rencontre dans les moteurs fusées à ergols liquides tel que le point A-10 introduit dans le Tableau 4.1 et déjà simulé par Le Touze [2015] en ajoutant les apports de cette thèse.

## Bilan

Dans ce chapitre, la densité d'aire interfaciale modélisée dans le [Chapitre 6](#) a été utilisée pour estimer une taille de goutte atomisée locale pour le couplage entre le SPS CHARME et le DPS SPIREE du code CEDRE. Tout d'abord, les modifications engendrées sur le terme source par le couplage avec la densité d'aire interfaciale ont été présentées ainsi qu'une première application sur le maillage LES-M9. Le couplage a d'abord été analysé sur des intégrales globales et a permis de mettre en évidence un débit d'atomisation par section très disparate mais aussi un régime transitoire très long. Dans un second temps, et afin d'obtenir des premières statistiques sur l'atomisation générée, une taille caractéristique du diamètre d'atomisation a été identifiée ainsi qu'une distribution dans la zone d'atomisation. Ensuite, l'intérêt de la modélisation diphasique incluant un SPS et un DPS couplés par une équation de densité d'aire interfaciale a été présenté par une étude comparative des coûts de calcul par rapport à une simulation DNS. Enfin, les perspectives de cette thèse ont été présentées notamment pour aboutir à un couplage SPS-DPS et un modèle de densité d'aire interfaciale général ainsi qu'à la validation du spray pour la modélisation choisie.



# Conclusion générale

Cette étude s'inscrit dans le domaine de la recherche sur la combustion au sein des moteurs-fusées à ergols liquides en conditions sub-critique. Le principal objectif de cette thèse était d'améliorer la description de l'atomisation primaire des jets liquides dans le régime extrême rencontré dans les chambres de combustion de ces systèmes propulsifs. Dans ce but, il a été choisi de s'appuyer sur une méthodologie LES, consistant à coupler de façon dynamique et instationnaire un modèle à phases séparées et un modèle à phase dispersée. Pour ce faire, une modélisation de l'atomisation primaire a été ajoutée par l'intermédiaire d'une quantité transportée supplémentaire, la densité d'aire interfaciale. Une configuration inerte issue de la littérature a été sélectionnée pour simplifier l'étude et se focaliser uniquement sur le phénomène d'atomisation. Des simulations DNS ont été utilisées afin d'obtenir des données de validation pour la modélisation de l'atomisation primaire. Celles-ci rendent possible l'identification d'échelles de coupures diphasiques permettant de positionner la limite de résolution du solveur phases séparées et donc du transfert vers le solveur phase dispersée. Le modèle de densité d'aire interfaciale a enfin permis de déterminer la distribution spatiale locale instantanée lors du passage vers la phase dispersée, permettant pour la première fois de réaliser des calculs LES diphasiques d'atomisation prédictifs de la granulométrie finale. Enfin, les résultats d'une simulation de l'ensemble des échelles diphasiques ont été présentés ainsi que l'intérêt de la méthode utilisée pour une application industrielle.

Le [Chapitre 1](#) a été consacré au contexte d'étude de cette thèse. L'histoire de la propulsion liquide a été retracée brièvement puis le fonctionnement d'un moteur fusée a été détaillé ainsi que les conditions pouvant entraîner l'apparition du régime sub-critique. Le [Chapitre 2](#) a fait un état de l'art théorique et expérimental sur les jets diphasiques atomisants. Un focus tout particulier a été réalisé sur la description du phénomène d'atomisation, à partir de la déstabilisation du cœur liquide jusqu'à la génération du spray. Le [Chapitre 3](#) a donné un aperçu de l'ensemble des moyens pour simuler un écoulement monophasique et diphasique ainsi que leurs difficultés propres. Les modélisations des codes DyJeAT et CEDRE ont été décrites en détail car elles ont été utilisées tout au long de la thèse.

Une fois le contexte et l'état de l'art de l'étude présentés, le [Chapitre 4](#) s'est attardé à illustrer le choix de la configuration coaxiale retenue. La simulation DNS réalisée par J.C Hoarau dans le cadre de son post-doctorat a été présentée car elle constitue la simulation utilisée comme référence au cours de cette thèse. De nombreux outils de post-traitement ont été développés pour permettre d'en extraire les quantités d'intérêt. La plupart fonctionnent en parallèle afin de traiter les volumes de données importants générés. Les principaux résultats de ces traitements, des champs moyens de densité d'aire interfaciale aux principales caractéristiques du spray, ont été analysés et ont servi de référence dans les chapitres suivants.

Le [Chapitre 5](#) a été consacré à une première étude LES des grandes échelles de l'atomisation. Pour cela une simulation de 96M mailles a été effectuée avec uniquement le solveur phases séparées. Cette simulation a permis de proposer une première interprétation d'une interface diffuse en considérant l'ensemble des cellules dans son épaisseur. Deux échelles de coupures diphasiques, une basée sur un critère issu de considération du volume et un deuxième sur le calcul de la surface d'interface ont été identifiées. Ces échelles permettent d'abord d'évaluer la qualité de la solution à phases séparées, de fournir des éléments pour le dimensionnement du maillage, et enfin de positionner la transition avec la phase dispersée ([Chapitre 7](#)). Les résultats de ce chapitre ont fait l'objet d'une présentation orale lors de la conférence *International Conference on Multiphase Flow* à Kobe en Avril 2023.

Le [Chapitre 6](#) constitue le plus gros apport de cette thèse. Afin de calculer une taille de goutte

à l'atomisation dépendant des conditions locales de l'écoulement, nous nous sommes intéressés à la densité d'aire interfaciale. Une modélisation adaptée au formalisme LES pour l'atomisation assistée a été développée et validée par comparaison à la DNS, permettant de converger vers une taille de goutte caractéristique du phénomène d'atomisation local au travers d'un Weber critique. La formulation du modèle dépend du différentiel de vitesse entre le liquide et le gaz qui a été modélisé par des considérations de jet libre pour l'écoulement gazeux. Le modèle a montré un excellent comportement sur plusieurs maillages, et une sensibilité faible à ses paramètres, notamment le Weber critique. Les développements associés au modèle ont été intégrés dans le code CEDRE et les travaux ont fait l'objet d'un article soumis à l'*International Journal of Multiphase Flow*.

Ce modèle ouvre la voie à un couplage dynamique entre le solveur phases séparées CHARME et le solveur phase dispersée SPIREE pour la taille des gouttes atomisées. Cette utilisation de la densité d'aire interfaciale a été présentée et appliquée dans le [Chapitre 7](#) sur une configuration déjà étudiée pour la validation du modèle. Les premiers résultats de cette simulation finale de la thèse ont montré des résultats prometteurs et permis de mettre en évidence des premières caractéristiques des gouttes atomisées, notamment une taille moyenne et une PDF. À la connaissance de l'auteur, il s'agit de la première simulation aux grandes échelles simulant l'intégralité des échelles diphasiques d'un jet atomisant où toutes les grandeurs du spray sont calculées à partir d'informations locales. Ceci permet d'envisager des simulations de configurations réactives pour la compréhension de phénomènes complexes tels que les instabilités de combustion. La validation par comparaison à des mesures expérimentales a été abordée et constitue un premier angle de poursuite de cette étude. Enfin, des perspectives ont été proposées, liées au modèle de densité d'aire interfaciale et à son utilisation dans le couplage entre le solveur phases séparées et le solveur phase dispersée.

# Annexes



# Interface area density model for Large-Eddy Simulation of assisted atomization in fiber regime

Cette annexe présente l'article de journal soumis à l'IJMF (*International Journal of Multiphase Flow*). Les résultats de cet article sont présentés dans le [Chapitre 6](#).

# Interface area density model for Large-Eddy Simulation of assisted atomization in fiber regime

F. Granger<sup>a,c</sup>, J.-C. Hoarau<sup>a</sup>, L.-H. Dorey<sup>a,\*</sup>, D. Zuzio<sup>b</sup>, J.-L. Estivalezes<sup>b</sup>

<sup>a</sup>DMPE, ONERA, Université Paris-Saclay, F-91123 Palaiseau - France

<sup>b</sup>DMPE, ONERA, Université de Toulouse, F-31055 Toulouse - France

<sup>c</sup>CNES - Transport Spatial - Etablissement Daumesnil, F-75612 Paris Cedex, France

---

## Abstract

In the context of simulating liquid rocket engines (LREs), accurately reproducing the complex combustion chamber environment poses a significant challenge. Recent works have shown that Direct Numerical Simulation has made good progress in achieving the simulation of the whole range of temporal and spatial two-phase flow scales involved. However, due to the computational costs, it is currently out of reach in an industrial context. Large-Eddy Simulations (LES) considerably reduce the computational cost but require modeling the two-phase flow at sub-grid level. A promising approach for such modeling is the interface area density (IAD) approach, which was developed initially for LES of flame fronts and subsequently adapted to Diesel jet atomization to recover spray droplet size distributions. In this method, a subgrid density of interface area is transported with an advection equation, while opportune source terms simulate its growth by breakup or its reduction by coalescence effects. In the context of the LREs assisted atomization, the complex mechanism of the assisted atomization in fiber regime must be taken into account by the subgrid model to recover the correct spray size distribution. The present work proposes a new interface area density evolution modeling for two-phase LES of coaxial assisted atomization in fiber regime. The proposed model focuses on recovering a realistic liquid-gas relative velocity at all the scales, enabling accurate modeling of sub-grid scales by using the IAD as a measure of liquid structure sizes.

*Keywords:* Liquid rocket engine, Fiber regime, Two-phase flow, Assisted atomization, Interface area density

---

## 1. Introduction

Atomization is the process by which a coherent liquid jet disintegrates into numerous independent structures. It finds many industrial applications such as agriculture, paint, and fuel injection. In most cases, the liquid is injected into a quiet atmosphere, resulting in a mechanical atomization piloted by turbulence. Conversely, in the constrained environment of combustion chambers, injectors of various shapes, either rectangular [30, 23, 17, 13], annular, or round [32] employ the so-called assisted atomization to pulverize the large mass-flow rates needed by the combustion chamber: a high-velocity gas stream accelerates the liquid, triggering two-phase instabilities which lead to the liquid atomization. During the development of a liquid rocket engine (LRE), several injector types and configurations are tested to ensure maximum performance and to check for possible combustion instabilities, which may lead to engine self-destruction, especially during the ignition phase. Numerical simulation offers a way to explore combustion instabilities, but it requires an accurate estimation of the couplings between the flame, the mechanical structure, and the liquid jet. Particularly, the precise measurement of the local liquid structure's size is crucial since the interaction between droplets and acoustics in the chamber is significant.

A significant challenge arises with coaxial injectors typically used in LRE, which generate complex liquid structures that can break up in droplets of a few microns [15] over a distance of several centimeters from the injection plane, depending on the regime. Some experimental studies have tackled the hard task of describing the atomization process and measuring granulometry using, among other techniques, laser-based techniques [16] or shadowgraphy imaging [32, 28]. These techniques have made it possible to observe different breakup regimes, but, despite the progresses that have been made, they can still only achieve a limited resolution or study a small part of the spray due to the very dense and multi-scale two-phase flow.

On the other hand, Direct Numerical Simulation (DNS) offers a way to simulate the atomization process and provide a large amount of detailed data on the liquid topology. Simulations of a coaxial liquid jet were first performed with Volume-Of-Fluid (VOF) approach [36, 34] at low Reynolds and Weber numbers, concentrating on the behavior of the intact liquid core and its instabilities. A coupled VOF/Level-Set/Large Eddy Simulation approach was proposed in [49] for a wider range of Weber numbers, up to the formation of a spray. More recent work based on the opensource software OpenFOAM [47] investigated the effect of several parameters on the primary atomization of a coaxial liquid jet at high Weber and Reynolds numbers [50, 51], such as the nozzle up-scaling and pressure. However, these works are still confronted to the inability to predict the flow small-scale characteristics, and in particular the size of the

---

\*Corresponding author

Email address: luc-henry.dorey@onera.com (L.-H. Dorey)

## Nomenclature

### Greek symbols

$\alpha$	volume fraction
$\Delta$	cell size ( $m$ )
$\delta'_\omega$	slope of vorticity thickness
$\eta$	similarity parameter
$\lambda_{\text{atom}}$	atomization indicator function
$\mu$	dynamic viscosity ( $kg.m^{-1}.s^{-1}$ )
$\Psi$	resolution indicator function
$\rho$	density ( $kg.m^{-3}$ )
$\Sigma$	interface area density ( $m^{-1}$ )
$\sigma$	surface tension ( $kg.s^{-2}$ )
$\tau$	characteristic time scale ( $s$ )

### Latin symbols

$\delta S$	area ( $m^2$ )
$\delta V$	volume ( $m^3$ )
$A$	large scale production time ( $s$ )
$a$	small scale production time ( $s$ )
$a_\lambda$	driving atomization indicator function coefficient
$b_\lambda$	position atomization indicator function coefficient
$D$	injector diameter ( $m$ )
$d$	drop diameter ( $m$ )
$D_s$	turbulence diffusion coefficient ( $m^2.s^{-1}$ )
$f$	frequency ( $s^{-1}$ )
$h$	gas injector thickness ( $m$ )
$K$	velocity decay coefficient
$k$	turbulent kinetic energy ( $m.s^{-1}$ )
$L$	characteristic length scale ( $m$ )
$R$	non dimensional injector transverse coordinate
$r$	distance from the axis ( $m$ )
$Re_{a,b}$	Reynolds number based on phase $a$ and length $b$

$S_{i,j}$	strain tensor ( $s^{-1}$ )
$T_m$	mixing layer thickness ( $m$ )
$U$	injection velocity ( $m.s^{-1}$ )
$u$	local velocity ( $m.s^{-1}$ )
$We_p$	Weber number of phase $p$
$X$	non dimensional injector axis coordinate
$x$	injector axis coordinate ( $m$ )
IAD	interface area density
LRE	liquid rocket engine
MFR	mass flow ratio
Oh	Ohnesorge number
VOF	volume of fluid

### Superscripts

'	sub-grid
*	non dimensional

### Subscripts

$\infty$	far field
$g$	gas
$l$	liquid
$p$	production
$t$	turbulence
atom	atomization phenomenon
axis	injector axis
co	collision
cr	critical value
DNS	direct numerical simulation
LES	large eddy simulation
max	maximum velocity in plane
rec	reconstructed term
res	resolved part

spray after primary (and secondary) atomization. The work of [46] focused again on the liquid core, examining the effect of the injection condition and the flow near injector lip up to a contact-angle problem. Despite these efforts, it remains a challenge to simulate the full range of two-phase flow scales of the entire spray, as it naturally requires extremely large meshes to resolve the smallest scales. Recent work attempted to simulate of the full scale of atomization using a massive coupled VOF/Level-Set simulation on a near 3 billions mesh cells [21], which for the first time explored and correlated the full distri-

bution of liquid volume and surface in space, together with the detection and classification of isolated liquid structures.

However, the sheer CPU cost of this simulation makes it impractical in an industrial setting. To reduce computational costs, Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) or Large Eddy Simulation (LES) approaches attempt to overcome this problem by using semi-empirical models to inject an Eulerian or Lagrangian sub-grid dispersed phase into the numerical domain [1, 43]. Despite their advantages, these models often ignore the complex phenomena in the dense zone close to the injector.



Several authors have identified the relevant non-dimensional parameters that classify atomization regimes and provide correlations to estimate atomized liquid structure sizes. Reynolds and relative Weber numbers were determined to correlate injection conditions to the flow regime for round jets [39], coaxial jets [12, 32], and cross-flowing liquid jets [41, 48]:

$$\text{Re}_{l,L} = \frac{\rho_l U_l L}{\mu_l}, \quad (1)$$

$$\text{We}_L = \frac{\rho_g (u_g - u_l)^2 L}{\sigma}. \quad (2)$$

with  $\rho$  the density,  $U$  the velocity,  $L$  a characteristic length,  $\mu$  the dynamic viscosity of the liquid  $l$  or the gas  $g$  and  $\sigma$  the surface tension of the liquid in the gas phase. In addition, a gaseous Weber number defined by:

$$\text{We}_g = \frac{\rho_g u_g^2 L}{\sigma}, \quad (3)$$

is used by Lasheras and Hopfinger [24] to define the different atomization regimes. In particular, the fiber regime encountered in LRE combustion chambers is characterized by high gas Weber and liquid Reynolds numbers,  $\text{We}_g \gtrsim 100$ ,  $\text{Re}_{l,L} \gtrsim 2000$ , and high momentum ratio  $J > 1$  [24, 5]. Under these conditions, the shearing effect of the gas induces a succession of Kelvin–Helmholtz and Rayleigh–Taylor instabilities at the gas–liquid interface, triggering the formation of thin ligaments that are stripped from the liquid jet and produce small droplets. Marmottant and Villermaux [32] derived an average drop size empirical law depending on the injection liquid Reynolds ( $\text{Re}_{l,L}$ ) and Weber ( $\text{We}_L$ ) numbers, although it provides only a time and space averaged value. Thus, available correlations can not provide a local drop size dependent on the local flow conditions, which is required for a precise coupling of the liquid jet with the acoustics.

The limitations of the existing correlations have motivated the development of new approaches to evaluate the local and instantaneous drop size in the atomization process. One promising way is to use a statistical approach, in which a characteristic sub-grid length scale is recovered in each interface cell from the resolved fluid quantities. The Eulerian-Lagrangian Sub-grid Atomization (ELSA) model from [45, 44] was explicitly designed to describe the atomization of flows with high Weber and Reynolds numbers. This approach is valid under two conditions: the Reynolds and the Weber number of the flow must be sufficiently large, so turbulence is predominant, and the interfacial forces can be neglected in front of the kinetic energy of the liquid-gas mixture. These assumptions allow to use a single momentum and mass conservation equation, a "one fluid" approach. The principle of the ELSA model is that the sub-grid interface topology can be statistically represented by the quantity of liquid/gas interface, known as the interface area density (IAD). The salient feature of the model comes from the fact that it does not assume that the liquid phase consists of spherical drops, settling it apart from the dispersed phase approaches. Besides, the model is meant to work mainly in the dense primary atomization regions, where the liquid topology is seldom

in the form of spherical droplets. Initially developed by Marble and Broadwell [31] to model the flame front sub-grid wrinkling, the quantity of interface within the cell or local interface area density can be defined as a function driven by an exact equation [33], which has to be closed. The interface area density  $\Sigma$  can be written as the ratio between the interface area  $\delta S$  and a given control volume  $\delta V$ :

$$\Sigma(\mathbf{x}, t) = \delta S / \delta V. \quad (4)$$

The general form of the  $\Sigma$  evolution can be modeled by a transport-diffusion equation with multiple source terms. These source terms account for various physical phenomena such as turbulent mixing between the liquid and gas phases, mean shear stress, breakup, and destruction caused by coalescence or vaporization. The formulation given by Vallet et al. [45] for RANS applications is the following:

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{\Sigma})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_s \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + (A + a) \bar{\Sigma} - V_s \bar{\Sigma}^2, \quad (5)$$

with  $\bar{\Sigma}$  being the average interface area density,  $D_s$  a diffusion coefficient,  $A$  and  $a$  respectively large and small scale characteristic production times, and  $V_s$  a coalescence coefficient. Vallet et al. [45] modeling approach assumes the existence of a critical local Weber number ( $\text{We}_{cr}$ ) at which the shearing and capillary forces balance each other, leading to the cessation of the atomization cascade. The closure terms for the IAD transport equation were mostly derived from single-phase turbulence concepts. An interesting assumption made in the Vallet et al. [45] model is that there must exist an equilibrium liquid droplet diameter characterizing this balance for  $\text{We}_{cr} = 1$ .

In recent years, there has been increasing interest in developing accurate numerical simulations of multiphase flows, particularly those involving complex interface area density equations. Based on the work of [45], Jay et al. [22] presented a cryogenic injector reacting flow simulation using an Arbitrary Eulerian-Lagrangian (ALE) multi-fluid approach coupled with both interface and flame density equations. The resulting IAD equation source term is rather complex, with two production terms: one by shearing effects near the injector instabilities and the other by the Taylor Analogy Breakup (TAB) [37]. The simulation results agreed well with experimental measurements of average interface area density and heat flux. Similarly, Lebas et al. [27] used the ELSA model to simulate the dense region of a Diesel jet, employing a split between a "dense" and a "dilute" zone based on the local value of the phase function (liquid mass fraction). In this case, two IAD source terms were active in the dense (turbulent source  $[\cdot]_t$ ) and dilute (collision source  $[\cdot]_{co}$ ) regions respectively, driven by a characteristic time  $\tau_{t,co}$  that rules the growth of  $\Sigma$  as given in equation (6):

$$\dot{\Sigma}_p = \frac{\bar{\Sigma}}{\tau_{t,co}} \left( 1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}_{t,co,cr}} \right), \quad (6)$$

with  $\bar{\Sigma}_{t,co,cr}$ , the critical  $[\cdot]_{cr}$  IAD characterizing the equilibrium IAD value. This approach was employed with a single-phase

flow model, in which the fluid is composed of two species, liquid and gas, with highly variable density. As in [45], geometrical and turbulent quantities were used to model these values. Comparisons were made with the Beau et al. [6] model and a DNS simulation from the CORIA ARCHER code. Duret et al. [14] performed Level-Set/VOF DNS simulations to measure the critical Weber number. The liquid was immersed in an Isotropic Homogeneous Turbulent (IHT) field in a three-dimensional cubical domain with periodic boundaries. A statistical analysis of the equilibrium Weber number was performed to verify the definition given by the ELSA model for various liquid volume fractions, mesh resolutions, and surface tensions. This study suggested using liquid kinetic energy or Favre averaged kinetic energy in the equilibrium Weber number.

Chesnel et al. [10] attempted an extension of [45] and [27] interface area density approach to the LES simulation of a Diesel jet. They introduced a decomposition of the interface area density into resolved and sub-grid parts consistent with the LES approach. The minimum resolved interface area density  $\Sigma_{\min}$  is reconstructed for theoretical spherical cells and is given by the following equation:

$$\Sigma_{\min} = 2.4 \sqrt{\alpha_l(1 - \alpha_l)}, \quad (7)$$

with  $\alpha_l$  the liquid volume fraction. The splitting ensures the convergence of the resolution of increasingly smaller scales towards a DNS simulation. Moreover, when the interface is sufficiently resolved, the total interface area density should tend towards the value resolved by the LES mesh. They also proposed a formulation for the critical Weber number, which is given as:

$$\text{We}_{\text{cr}} = \alpha_l(1 - \alpha_l) \frac{\widetilde{\rho k_g}}{\sigma \Sigma'_{\text{cr}}}, \quad (8)$$

with  $\widetilde{k_g}$  the filtered sub-grid kinetic energy and  $\Sigma'_{\text{cr}}$ , the sub-grid critical IAD. In consequence, the critical threshold of interface area density takes the following form:

$$\Sigma_{\text{cr}} = \Sigma_{\min} + \alpha_l(1 - \alpha_l) \frac{\widetilde{\rho k_g}}{\sigma \text{We}_{\text{cr}}}. \quad (9)$$

The practical value of the critical Weber number is set to 1 as for Vallet et al. [45], indicating a state of equilibrium between turbulent energy and surface tension forces. Additionally, the assumption of turbulent atomization is adopted for the characteristic time, which is determined using a Boussinesq-like approximation as follows:

$$\frac{1}{\tau_t} = |\overline{S}| = \sqrt{2\overline{S_{i,j}}\overline{S_{i,j}}}, \quad (10)$$

with

$$\overline{S_{i,j}} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (11)$$

The so-formulated sub-grid IAD model for the LES formalism has given promising results on Diesel jets with mechanical atomization.

In the particular configuration of the coaxial assisted atomization in fiber regime, the several hypotheses made in the previous work are not adapted to the nature of the flow. In particular, in high-energy assisted atomization, the liquid destabilization and breakup are expected to originate from the interfacial instabilities rather than from turbulent effects alone. The critical Weber number should also be a function of the local shear effect, as the liquid structures tend to the local equilibrium with the gas as they travel downstream. This study's proposed model aims to take into account this particular physical phenomenon. In the same way as for the original ELSA formulation, the model is built to work together with a dense two-phase solver, able to simulate the largest scales of primary atomization, its goal being to recover a local characteristic liquid surface. This value may be used for several purposes, among them as an initial diameter for a dispersed phase model (similar to a D32 diameter) or as an input for a phase-change model, wherever the multi-fluid solution becomes poorly resolved on the LES mesh. In the presented paper, the model is coupled to a diffuse interface multi-fluid model.

The model is based on the same transport-diffusion equation as Chesnel et al. [10] with a redefined source term. The proposed formulation for the critical Weber number defined in Equation 2 relies heavily on the relative velocity between the gas and the liquid. To this purpose, an innovative method to estimate the liquid/gas relative velocity is presented. The adapted model is then applied in an LES simulation of a coaxial injector under LRE conditions, and the results are compared to DNS reference data for validation.

## 2. Configuration

The study investigates a single coaxial injector typical of an LRE, designed to produce a fiber regime atomization in the chamber. The configuration is based on an experimental setup from Ficuciello et al. [18] to study the effect of acoustics on a water/air spray. This configuration was investigated numerically by Rutard et al. [40] with the ONERA multiphase flow code CEDRE. This geometry was also studied by Hoarau et al. [21] at a lower density ratio to improve the DNS robustness. This work provided a detailed analysis of the flow focusing on the atomization process with precise IAD measurements, unavailable from experimental sources, that were used to develop and validate the model proposed in the present paper.

That is why conditions in this paper were chosen identical to the DNS of Hoarau et al. [21] while Reynolds numbers, Weber number and momentum ratio remain identical to the previous studies [40, 21] and correspond to fiber-type atomization regime as defined by Lasheras and Hopfinger [24]. The actual parameters used in the present paper are given in Table 1 along with the ones of the two previous studies.

Depiction of a typical two-phase field encountered from a coaxial injector in fiber regime is drawn in Figure 1, with  $D_l$  the liquid injection diameter, and  $h_g$  the thickness of the gas ring.

	LES [40]	DNS [21]	present LES
Domain dimensions [ $L_x/D_l, L_y/D_l, L_z/D_l$ ]	$10.7 \times 8.9 \times 8.9$	$18.6 \times 5.8 \times 5.8$	$11 \times 5.8 \times 5.8$
Liquid/gas density ratio	$\sim 1000$	$\sim 100$	$\sim 100$
Momentum ratio	4	4	4
$Re_l$	$5 \times 10^3$	$5 \times 10^3$	$5 \times 10^3$
$Re_g$	$\sim 10^4$	$\sim 10^4$	$\sim 10^4$
$We_g$	$4.9 \times 10^2$	$4.9 \times 10^2$	$4.9 \times 10^2$

Table 1: Simulation data from [40], DNS [21] and the LES of the study

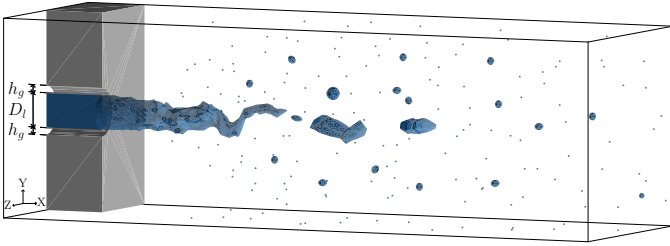


Figure 1: Scheme of coaxial injection in fiber regime

### 2.1. Computational framework

In this study, the proposed model works within a computational LES framework for solving dense multiphase flows. The framework consists of the CEDRE software platform, which has already been successfully employed to simulate similar flows in Le Touze et al. [26] and [40]. CEDRE is based on the compressible multiphase, multi-specie Navier-Stokes equations discretized by a Finite Volume approach on general unstructured meshes. The multiphase model can handle an arbitrary number of phases. Within this work, a two-phase, gas and liquid, flow is considered: the model becomes a diffuse interface approach based on the homogeneous relaxation, also referred to as the 4-equation model. It is a simplified model obtained by imposing infinitely rapid relaxations on the original Baer-Nunziato 7-equations model [4]. Consequently, in each control volume, there exists only one velocity, one pressure and one temperature, besides the mass concentrations of species and phases. Therefore, the equilibrium hypothesis does not allow the modeling of momentum or temperature in-cell exchanges. As the diffuse interface method is not suited to resolve the small liquid structures composing the spray, it is used in this work to solve the largest primary atomization scales and feed the proposed ISD model. The modeling of the spray generated by the liquid atomization is usually done in CEDRE by dynamically switching to appropriate statistical dispersed phase models (they will not be used in this paper). One possible application of the ISD model would be to give information on the characteristic size of the dispersed phase during the dense-dispersed transition.

The 4-equation model is expressed as the equation system (12) for the conserved quantities  $\mathbf{Q}(\mathbf{U}) = (\rho Y_l, \rho Y_g, \rho u, \rho e_t)^t$ , with  $Y$  the mass fraction for either the liquid or the gas,  $u$ ,

$\rho$  and  $e_t$  the mixture velocity, density and total energy. The conserved quantities are function of the natural variables  $\mathbf{U} = (Y_l, Y_g, p, T, \mathbf{u})^t$ .

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{F} - \psi_D - \psi_C) = 0, \quad (12)$$

where  $\nabla \cdot ()$  is the divergence operator. Since no mass transfer was considered and gravity was considered as in-influential for the considered flow, no source terms appear on the right-hand side of (12). The density  $\rho$  of the mixture is computed as  $\rho = \rho Y_l + \rho Y_g = \alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l$ , with  $\alpha_i = \rho Y_i / \rho_i$  the  $i$ -th phase volume fraction. The phase volume fractions are obtained by imposing volume conservation through the equations of state of each phase, function of local pressure, temperature and bulk phase densities  $\rho_g$  and  $\rho_l$  (see [26] for details). The considered equations of state are perfect gas,  $p = \rho RT$  and weakly compressible liquid,  $p_l(p) = \rho_0 [1 + \beta_0 (p - p_0)]$ ,  $\beta_0$  being the isothermal compressibility at the reference state  $p_0, \rho_0$ .

In system (12), the convective flux are written as  $F = [Q \otimes \mathbf{u} + p(0, 0, \mathbf{I}, \mathbf{u})^t]$ , with  $I$  the identity tensor and  $\otimes$  the tensor product. The diffusive fluxes read  $\psi_D = [0, 0, \tau, (\tau \cdot \mathbf{u} + \lambda \nabla T)]^t$ , where  $\lambda$  is the thermal conductivity. Heat diffusion is considered even if the proposed test case is isothermal. Inter-specie diffusion may be considered in the bulk phases, though single-specie phases were used in this work. For the turbulence modeling, Boussinesq's eddy viscosity model is adopted, so that the viscous stress tensor can be written in function of the resolved symmetric strain rate tensor as:

$$\tau = 2(\mu + \mu_t) \mathbf{D}, \text{ with } \mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^t] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) I. \quad (13)$$

The modeling of the turbulent viscosity is done via the formulation proposed by Nicoud et al. [35]. It is based on the three singular values of the local velocity gradient tensor  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \geq 0$ , which are used to express the subgrid turbulent viscosity as:

$$\mu_t = \rho (C_\sigma \Delta)^2 \frac{\sigma_3 (\sigma_1 - \sigma_2) (\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2}, \quad (14)$$

with the constant  $C_\sigma = 1.35$  and  $\Delta$  the local size of the mesh. This model was designed to have better intrinsic properties than

existing formulations. In particular, it has the appropriate behavior close to solid boundaries, which is an important property for downstream mixing layer simulation.

Finally, the turbulent frequency is given by  $f_t = (2\mathbf{D} : \mathbf{D})^{1/2}$ .

Surface tension is implemented via the Continuum Surface Force of Brackbill [8] written in the conservative formulation, Continuum Surface Stress, as proposed by [19]. The capillary fluxes read  $\psi_C = [0, 0, \tau_C, (\tau \cdot \mathbf{u})]^t$ , with the capillary stress tensor written as:

$$\tau_C = \sigma \|\nabla \alpha_l\| \left( \frac{\nabla \alpha_l}{\|\nabla \alpha_l\|} \otimes \frac{\nabla \alpha_l}{\|\nabla \alpha_l\|} - I \right), \quad (15)$$

with  $\sigma$  the coefficient of surface tension. (15) can be extended to a number of phases greater than two.

To limit the numerical diffusion of the interface, an interface sharpening method, originally developed by Chiapolino et al. [11], has been implemented and used in this study [25].

## 2.2. Meshes and convergence study

The proposed model is designed to work together and complement the dense two-phase solver introduced in the previous section, simulating the largest scales of the primary atomization. The accuracy of the dense phase solution can significantly impact the model's behavior, as the former implicitly defines a two-phase cut-off scale separating the "resolved" scales from the "subgrid" scales. For this reason, the following study will assess the behavior of the model on three increasingly fine LES mesh sizes (LES-M5, LES-M9 and LES-M20): the sought outcome is to recover relative mesh independence, where the model can recover the unresolved scales on any of the meshes. The cell number of each mesh is reported in Table 2.

	LES-M5	LES-M9	LES-M20
Cell number	5.2M	9M	20M

Table 2: LES mesh configurations

To compare the cell size between the different cases, the transverse-averaged cell size in the atomization zone for the three LES and the DNS from Hoarau et al. [21] are shown in Figure 2. The cell size is computed using the hydraulic diameter  $\Delta$ , which provides consistent results regardless of the cell type used:

$$\Delta = \frac{6V_{\text{cell}}}{S_{\text{cell}}}. \quad (16)$$

Figure 2 gives the scope of cell size in the atomization zone identified on the DNS. The LES-M20 mesh shows cell diameters of the same order of magnitude as the DNS ( $\sim 0.22 \Delta / \delta_{\text{tip}}$ ) in the atomization zone.

The LES-M9 mesh will be used to validate the IAD model, whereas the other meshes will be employed to test mesh convergence. The atomization process occurring is presented for the LES-M9 case in an instantaneous field on Figure 3. The

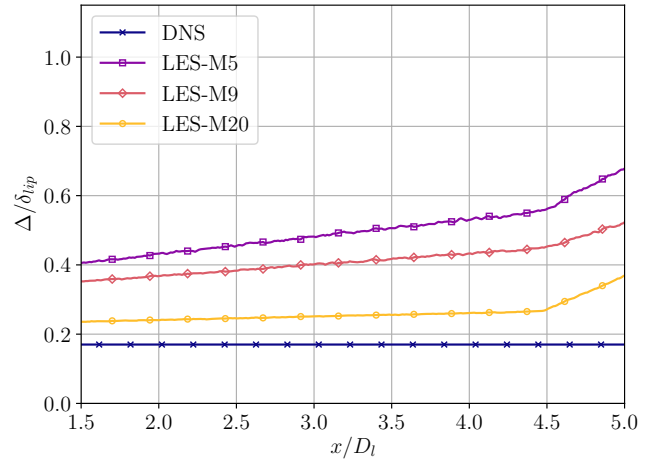


Figure 2: Average cell size in the atomization zone

plot shows an instantaneous field of the liquid volume fraction  $\alpha_l$ , in yellow the liquid-filled cells, in blue the gas-filled cells, cut on the centerline of the injector. The picture shows the clearly visible liquid conical dart, spanning some diameters in the streamwise direction. The dart undergoes a longitudinal large-scale oscillation under the effect of the shearing gaseous flow. At the same time, thin ligaments ("fibers") are created by shear stress-induced instabilities on its surface, which give the name to the particular primary atomization process. Large liquid structures detach from the main body, near the axis of the jet, due to the thinning of the liquid and its oscillations. These ligaments undergo further breakup up to the formation of a population of large droplets, the smallest resolved structures. At the same time, smaller liquid structures detach from the thinner surface ligaments, which would form the first population of small droplets in the actual jet.

As the LES/multi-fluid method is not designed to capture the smallest droplets, the solution of the ligaments breakup appears as a diffuse zone except for the largest ones: in these zones, the liquid volume fraction is small and no interface can be captured anymore. These regions are specifically the ones that the proposed model aims to characterize through the reconstruction of a characteristic liquid length scale, given by the ISD model.

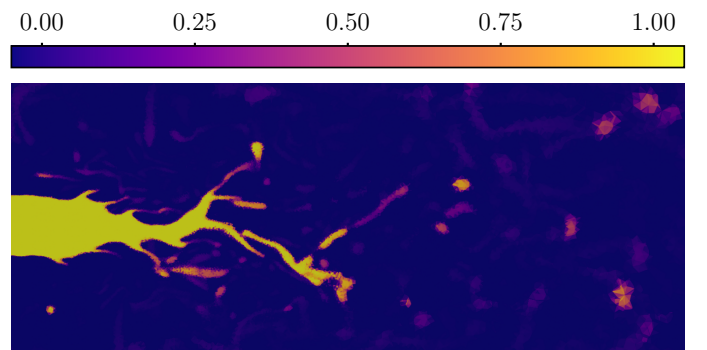


Figure 3: Instantaneous liquid volume fraction field on LES-M9

### 2.3. Model validation strategy

The validation of the model will be performed against the data available from the DNS of Hoarau et al. [21]. To compare the model and the DNS, the LES simulation is realized on the same geometry and with the same boundary conditions. The domain is only shorter than the DNS, as the spray downstream of the atomization zone is not the focus of this study. In particular, the mesh refinement is identical within the injector for the LES cases defined in Section 2.2. To confirm this, Figure 4 presents the gas and liquid mean velocity profiles at injection,  $X = 0$ . As observed, the LES and DNS profiles are very closely matched, with only a slight difference in the external radius of the gas injector. This difference is not significant as the atomization process occurs at inner radius positions, where the LES gas velocity profiles align with those of the DNS. No turbulence was added to the injection boundary conditions in either simulation.

### 3. Model formulation

This section presents a new IAD model adapted for LES of assisted atomization, inspired by the work of Chesnel et al. [10]. The model decomposes the IAD  $\Sigma$  into two parts, namely a resolved  $[\cdot]_{res}$  and a sub-grid  $[\cdot]'$  part, similar to the decomposition used for turbulence modeling:

$$\Sigma = \Sigma_{res} + \Sigma' . \quad (17)$$

The resolved part of the ISD,  $\Sigma_{res}$ , is computed by the separate phases solver, in this case the multi-fluid described in Section 2.1. The interfacial model is a diffuse interface, in which the interface is "captured" by smooth variations of the local volume fractions. In order to get consistent and accurate values for liquid structures surface, the liquid volume fraction  $\alpha_l$  was taken as a smoothed Heaviside function. In consequence, its derivative can be used as a smoothed Dirac function describing the discrete interface. The definition for the resolved interface area density is therefore based on the gradient of the liquid volume fraction as:

$$\Sigma_{res} = \|\nabla\alpha_l\| . \quad (18)$$

This definition allows the computation of the actual surface of a liquid structure, and gives results accurate up to  $\approx 1\%$  on a structure described by the full range of volume fraction, i.e.  $0 \leq \alpha_l \leq 1$ . This means that the resolved surface density accounts for all the large scale resolved liquid structures surface, such as the liquid core.

The IAD sub-grid part obeys an advection-diffusion equation:

$$\frac{\partial \Sigma'}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \Sigma'}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_s \frac{\partial \Sigma'}{\partial x_i} \right) + \dot{\Sigma}_p . \quad (19)$$

Similar to the approach presented by [10], the diffusive term, the first term on the right-hand side of Equation 19, is modeled like a turbulent diffusion mechanism, with a turbulent diffusion coefficient  $D_s$ . This coefficient is chosen the same as

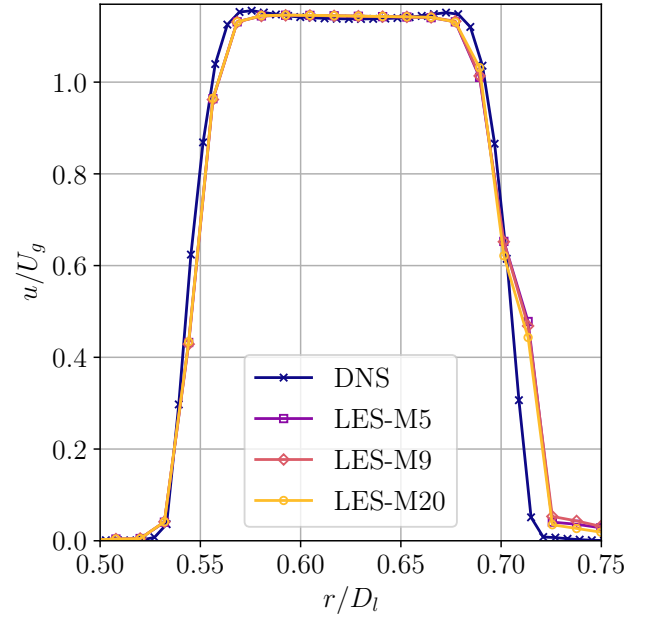
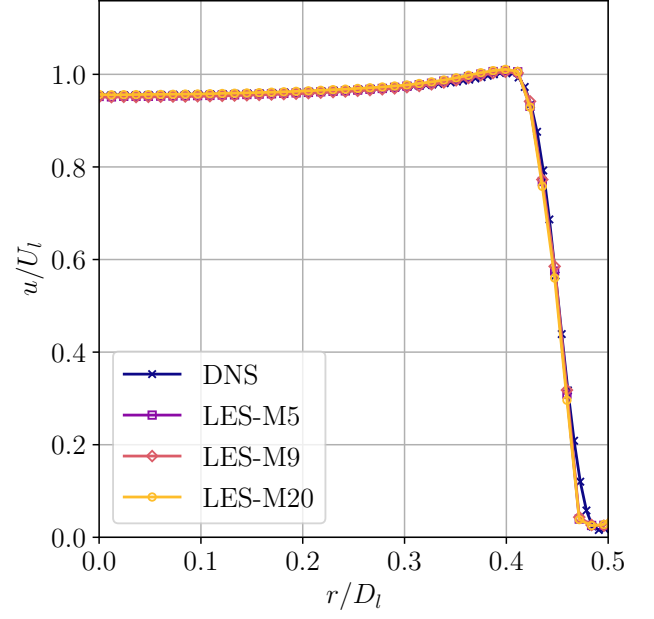


Figure 4: Liquid (top) and gas (bottom) injection mean velocities at  $X = 0$  for DNS and LES

the one of the turbulence model employed for closing the momentum equation.  $\dot{\Sigma}_p$  is the source term of interface production defined as an equilibrium relaxation term tending to an equilibrium value, in which the atomization is finished:

$$\dot{\Sigma}_p = f_{atom} \times \lambda_{atom} \times \Sigma \times \max \left\{ \left( 1 - \frac{\Sigma}{\Sigma_{cr}} \right), 0 \right\} \times \Psi . \quad (20)$$

The production source term  $\dot{\Sigma}_p$  relies on several terms including the characteristic frequency of IAD creation  $f_{atom}$ , an

atomization location term  $\lambda_{\text{atom}}$ , a mesh convergence term  $\Psi$ , and the critical value of interface area density  $\Sigma_{\text{cr}}$ . The detailed definition of these terms will be given in the subsequent sections.

### 3.1. Atomization frequency

The characteristic time of the interface area density is a key parameter, written as a frequency is denoted as  $f_{\text{atom}}$ , and used in Equation 20 to describe the rate at which  $\Sigma$  approaches its equilibrium value. Unlike the characteristic time used for diesel jet atomization in Equation 10, which is related to turbulence through the strain tensor  $S$ , the characteristic time for assisted atomization depends on the relative velocity between the gas and the liquid  $|u_g - u_l|$ . A dimensionless characteristic frequency of drop breakup by Rayleigh-Taylor or Kelvin-Helmholtz instabilities, proposed by Pilch and Erdman [38], is used to define this characteristic time:

$$f^* = \frac{|u_g - u_l|}{d_{\text{min}}} \left( \frac{\rho}{\rho_l} \right)^{0.5}, \quad (21)$$

with  $d_{\text{min}}$  a characteristic diameter detailed below,  $\rho$  the local density,  $\rho_l$  the liquid density and  $|u_g - u_l|$  the liquid/gas relative velocity which requires a closure (Section 4) for the two-phase modeling defined in Section 2.1. Although Equation 21 provides a dimensionless characteristic frequency of drop breakup, it does not directly represent the timescale for interface creation and requires a more detailed analysis of the breakup phenomena. As noted by Hoarau et al. [21], the maximum creation of interface area density is located in regions with ligaments both attached to the liquid core and detached from it. This suggests that the characteristic time for interface area density is related to the initiation of breakup described by Pilch and Erdman [38] as:

$$f^*/f_{\text{atom}} = 1.9(\text{We}_{\text{local}} - 12)^{-0.25}(1 + 2.2 \text{Oh}^{1.6}), \quad (22)$$

with  $\text{We}_{\text{local}}$  the local Weber number, that relies on a local characteristic length defined with the local  $\Sigma$  value as in Equation 23:

$$\text{We}_{\text{local}} = \frac{\rho(u_g - u_l)^2}{\sigma\Sigma}, \quad (23)$$

and the Ohnesorge number that describes the deformation of liquid structures as in Equation 24 by relating viscous forces to surface tension and inertial forces:

$$\text{Oh} = \frac{\mu_l}{(\rho_l L \sigma)^{0.5}}. \quad (24)$$

For the configuration studied, Marmottant and Villermaux [32] predict an average atomized drop diameter of  $0.55 \delta_{\text{lip}}$ , resulting in  $\text{Oh} \sim 0.01$ . A small Ohnesorge number indicates that surface tension and inertial forces dominate over viscosity, resulting in low-viscosity drops.

### 3.2. Critical Weber number

The critical value  $\Sigma_{\text{cr}}$  represents the maximum quantity of IAD attainable in a given configuration. Similar to the IAD,  $\Sigma_{\text{cr}}$  can also be decomposed into a resolved part  $[\cdot]_{\text{res}}$  and a fluctuating part  $[\cdot]'$ , following the same method as described in Equation 17:

$$\Sigma_{\text{cr}} = \Sigma_{\text{res}} + \Sigma'_{\text{cr}}, \quad (25)$$

with  $\Sigma'_{\text{cr}}$  the sub-grid part of the interface area density critical value.  $\Sigma'_{\text{cr}}$  contains all the physics of IAD creation, including primary breakup and coalescence. In assisted atomization, the relative velocity between the gas and the liquid is crucial for interface creation, and this needs to be accounted for in the modeling of  $\Sigma'_{\text{cr}}$ . To close the  $\Sigma'_{\text{cr}}$  term, Chesnel et al. [10] use the critical Weber number given in Equation 8. Pilch and Erdman [38] give an experimental correlation for the critical Weber value of droplets. It depends on the Ohnesorge number and is defined in Equation 26:

$$\text{We}_{\text{cr}} = 12 \left( 1 + 1.077 \text{Oh}^{1.6} \right). \quad (26)$$

Using the Ohnesorge number previously determined for the configuration studied, Equation 26 gives  $\text{We}_{\text{cr}} \sim 12$  in a laminar flow. As the atomization process creates structures of various shapes, including elongated ligaments that are necessarily less stable than droplets, the critical Weber number is expected to be lower than 12 but higher than  $\text{We}_{\text{cr}} = 1.18$  given by Hinze [20] for droplets in a flow dominated by turbulence. The value for this configuration is provided in Section 5. Using a  $\text{We}_{\text{cr}}$  within this range, the maximum stable diameter of atomized droplets definition from Pilch and Erdman [38] is extended to liquid structures of general shapes and is identified as  $1/\Sigma'_{\text{cr}}$  in this paper:

$$\Sigma'_{\text{cr}} = \frac{\rho(u_g - u_l)^2}{\sigma \text{We}_{\text{cr}}} \times \left( 1 - \frac{v_{\text{drop}}}{|u_g - u_l|} \right)^2, \quad (27)$$

with  $v_{\text{drop}}$  the velocity of liquid structures that just detached from the main liquid core, further referred to as the atomization velocity. Equation 27 points out that the atomization velocity modeling directly influences the interface creation. A slower atomization velocity would result in a larger interface area as the structure could be deformed or broken up by the gas. In contrast, a higher atomization velocity would result in a smaller IAD creation as liquid structures would be closer to the equilibrium. This paper assumes that droplets are atomized at a velocity equal to the local liquid velocity. By injecting  $v_{\text{drop}} = u_l$  into Equation 27, the sub-grid critical value of IAD becomes:

$$\Sigma'_{\text{cr}} = \frac{\rho(u_g - 2u_l)^2}{\sigma \text{We}_{\text{cr}}}. \quad (28)$$

Equation 28 differs from the traditional Weber number formulations that depend on  $\Delta V$ . An interpretation of this difference is that, by choosing the initial droplet velocity as the local velocity, the atomization process occurs only when  $u_g > 2u_l$ . Otherwise, no fragmentation of the structure happens as the relative velocity is not sufficient to break the liquid structure. The

local drop diameter is then defined by solving Equation 28 for the characteristic length:

$$d_{\min} = \frac{1}{\Sigma'_{\text{cr}}} = \text{We}_{\text{cr}} \frac{\sigma}{\rho|u_g - 2u_l|^2}, \quad (29)$$

where  $d_{\min}$  is the diameter that describes the size of the smallest possible atomized structures and will be further used in the model.

### 3.3. Atomization location

Assuming that the assisted atomization process is solely driven by the relative velocity between the liquid and the gas is not sufficient to accurately model the IAD creation. As described in Hoarau et al. [21], the atomization process does not occur right after the liquid comes out from the injector despite having the highest relative velocity with the gas flow. In fact, it takes time for the Rayleigh and Plateau instabilities to grow and finally create interface through ligaments. In other words, without any additional term, the model would predict IAD creation right out of the injector, which is not consistent with observations [21]. Therefore, an additional term  $\lambda_{\text{atom}}$  is required in Equation 20 to delay the IAD creation in the chamber and is defined as an indicator function ( $\mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ ):

$$\lambda_{\text{atom}}(X) = \frac{1}{1 + \exp(-b_\lambda(X - a_\lambda))}. \quad (30)$$

$b_\lambda$  characterizes the slope of the  $\lambda_{\text{atom}}$  function and  $a_\lambda$  is the position for which  $\lambda_{\text{atom}} = 0.5$ . The purpose of the  $\lambda_{\text{atom}}$  function is to be equal to 1 downstream of the atomization zone and 0 upstream. The value of  $a_\lambda$  is then determined by imposing a value close to 1 (0.9 in this section) at the atomization startup position  $X_{\text{atom}}$ . An estimation of the average breakup length  $X_{\text{atom}}$  was obtained by the results of the DNS. This length is given by the position of the average volume fraction  $\alpha_l = 0.5$  iso-contour, and corresponds to the maximum IAD production location as per [21]. This leads to a coefficient  $a_\lambda = 1.70$ , which will be used in subsequent parts of this study together with  $b_\lambda$  fixed to 5.

A sensitivity analysis of these parameters is conducted in Appendix A. The results suggested a strong influence of the length scale (parameter  $a_\lambda$ ), and a very limited influence of the function shape (parameter  $b_\lambda$ ). In the proposed paper, the coefficient  $a_\lambda$  was expressly "tuned" on the DNS results, so that the  $\lambda_{\text{atom}}$  gives the good length scale for triggering ISD generation. This value may need further tuning when confronted to different atomization regimes. On the other hand, the physical quantity involved may be easily recovered using a local, more refined preliminary simulation, available experimental data, or correlations on the characteristic development time of the ligaments.

### 3.4. Mesh dependence

One notable distinction from the modeling approach presented in [10] is that the sub-grid critical IAD  $\Sigma'_{\text{cr}}$  does not depend on modeled sub-grid quantities, but it relies on resolved field quantities. This implies that i) the resolution of the dense

phase model has a direct influence on this term, and ii) the model must activate only where a local under-resolution of the two-phase dense solution is detected. In other words, the coupled LES and IAD model should rebuild the missing scales for a large range of LES mesh sizes, but it should degenerate towards a model-less DNS under unrestricted mesh refinement.

To recover mesh independence of this term, an extra term  $\Psi$  was included in Equation 20. The formulation of  $\Psi$  requires an estimation of the smallest possible liquid structure scales, which has been defined as  $d_{\min}$  in Equation 29. Indeed, the model should then be aware of the difference between the smallest resolved scales the LES can simulate, and the actual expected smallest liquid scales in the flow.

A reconstructed interface approach has been shown to accurately resolve the smallest structures up to  $2\Delta$  in [21], whereas this number is expected to be higher with a diffuse interface model. In this paper, the resolution criterion is based on the measurement of the liquid structure's interface area  $A$ . This area is equal to the integral of the volume fraction gradient, or  $\Sigma_{\text{res}}$  (Equation 18):

$$A = \int \Sigma_{\text{res}}. \quad (31)$$

If a liquid structure contains cells with  $\alpha_l = 1$ , Equation 31 gives the actual liquid structure interface area. To characterize the resolution of the diffuse interface model used in this paper, deep analysis of results of a spray simulation on a very fine mesh, not shown in this paper for the reason of conciseness, showed that most liquid structures whose size is  $D_{30} > 5\Delta$  contain one or more cells with  $\alpha_l = 1$ . That indicated that Equation 31 could accurately retrieve these structures' interface area with the gradient of the liquid volume fraction. Taking this condition as a resolution criterion, we propose to express the  $\Psi$  function as follows:

$$\Psi(d_{\min}, \Delta) = \begin{cases} 1 - \frac{d_{\min}}{5\Delta} & \text{if } 5\Delta > d_{\min}, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (32)$$

$\Psi : (\mathbb{R}_0^+)^2 \rightarrow [0, 1]$  is the resolution indicator function, whose shape is chosen arbitrarily here. In cells with a characteristic size smaller than the smallest two-phase flow scales,  $\Psi \rightarrow 0$ , deactivating the IAD model. Conversely, if the cell size is much larger than the smallest two-phase flow scale, then  $\Psi \rightarrow 1$ . The  $\Psi$  function is plotted in Figure 5 for a range of cell size that would be encountered in a practical mesh from  $0 \mu\text{m}$  to  $500 \mu\text{m}$  for four  $d_{\min}$  values from  $10 \mu\text{m}$  to  $200 \mu\text{m}$ .

## 4. Prediction of velocity profiles

The main challenge in the presented IAD model lies in accurately estimating the gas and liquid velocities ( $u_g$  and  $u_l$ ) involved in the definition of Weber numbers, in Equation 23, Equation 28 and Equation 29. Indeed, estimations of a critical Weber number are usually given for an isolated liquid structure of velocity  $u_l$  immersed into an unperturbed uniform gas stream of velocity  $u_g$  [42]. In particular, in the 4-equations diffuse interface model used in this study, a local equilibrium hypothesis



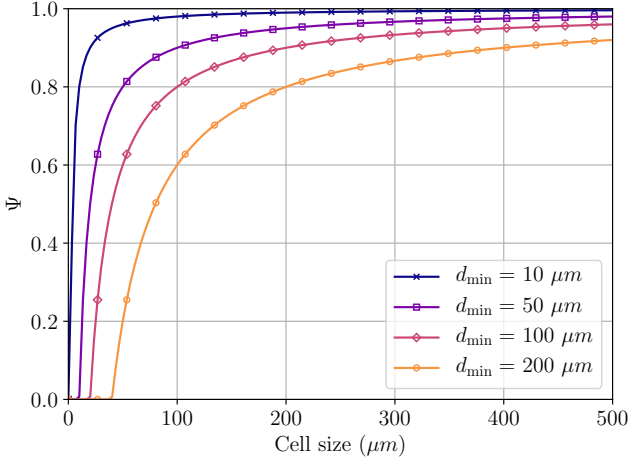


Figure 5: Resolution indicator function  $\Psi$

is made, i.e. the local cell velocity denoted as  $u$  is the same for both fluids  $u = u_g = u_l$ . To estimate the liquid velocity, Blanchard [7] showed that the velocity  $u$  could be a good approximation of the liquid velocity in cells containing both liquid and gas if the liquid density  $\rho_l$  significantly exceeds the gas density  $\rho_g$ . This condition, considered satisfied for  $\alpha_l \gg 10^{-3}$ , is verified for most cells in the liquid core interface, where the IAD model is actively applied.

To determine the gas velocity  $u_g$  responsible for the local breakup, and thus driving the atomization model, one possible approach is to use the gas injection velocity  $U_g$  to estimate the local Weber number of a liquid structure. This approach would yield accurate values of the local Weber number near the back plate, where the gas velocity is similar to the injection velocity. However, this approach would lead to an overestimation of the Weber number in the atomization zone due to the rapid deceleration of the gas caused by the expansion of the jet in the chamber and the friction with the liquid. This paper proposes an alternative method to estimate the gas velocity in a coaxial injector based on free jet considerations. By employing this approach, detailed below, a more accurate estimation of the gas velocity in the atomization zone can be obtained.

#### 4.1. Velocity decay in free jets

The study conducted by Malmström et al. [29] presented experimental data on velocity decay and transverse velocity profiles of an axisymmetric jet. The decay of centerline velocity is modeled using a simple  $1/x$  law:

$$\frac{u_{\text{axis}}(x)}{U_{\text{inj}}} = K \frac{D_{\text{inj}}}{x}, \quad (33)$$

with  $U_{\text{inj}}$  the injection velocity,  $u_{\text{axis}}(x)$  the centerline mean velocity,  $D_{\text{inj}}$  the injection diameter and a velocity decay coefficient  $K$ . The radial velocity profiles are determined under the self-similarity hypothesis by the following law:

$$\frac{u(x, \eta)}{u_{\text{axis}}(x)} = e^{-\ln(2)\eta^2}, \quad (34)$$

where  $u(x, \eta)$  is the mean velocity at the distance  $x$  from the backplate at a non-dimensional transverse coordinate  $\eta = r/r_{0.5}$  (also known as similarity parameter), with  $r$  the distance to the jet axis and  $r_{0.5}$  the radius where  $u(x, 1)/u_{\text{axis}}(x) = 0.5$ . The laws (33) and (34) were extended by Awbi [3] to various non-circular free jets configurations. For instance, in the case of plane jets, which are infinitely long rectangular injectors, the decay law follows a  $1/\sqrt{x}$  decrease. It is worth noting that Malmström et al. [29] demonstrated that the decay coefficient  $K$  remains independent of the injection conditions  $U_{\text{inj}}$  and  $D_{\text{inj}}$ .

#### 4.2. Gas velocity decay in coaxial jets

To evaluate a velocity decay law in a coaxial liquid-gas jet, two gas velocity decay laws  $u_{g,\text{max}}$  adapted from round ( $[\cdot]_{\text{rnd}}$ ) and plane ( $[\cdot]_{\text{pla}}$ ) free jets [3] are fitted to the gas velocity decay from the DNS data:

$$u_{g,\text{max},\text{rnd}} = u_{\infty} + U_g \times K \times h_g/x, \quad (35)$$

and

$$u_{g,\text{max},\text{pla}} = u_{\infty} + U_g \times K \times (h_g/x)^{0.5}. \quad (36)$$

To ensure a non-zero value for the gas velocity in the far field, a constant  $u_{\infty}$  is added to the fitted functions, showing improved results. The coefficients  $u_{\infty}$  and  $K$  obtained for the given coaxial configuration are provided in Table 3. These coefficients are specific to the coaxial geometry and differ from those found for plane and free jet configurations, as the geometry of the coaxial setup is significantly different with the presence of a liquid jet. Both fitted functions, with the parameters provided in Table 3, exhibit excellent agreement with the gas velocity decay as shown on Figure 6.

Some small differences are observed, particularly in the region between 1.5 and 7.5  $D_1$ . The differences for the  $\sqrt{1/x}$  fitted function appear to be more significant in the region between 1.5 and 5.0  $D_1$ . On the other hand, the  $1/x$  fitted function shows good agreement in this zone but exhibits differences with the DNS data between 3 and 7.5  $D_1$ . Since the atomization process begins at 1.5  $D_1$  and reaches its maximum at 2.5  $D_1$  [21], the choice is made to use the  $1/x$  velocity decay function as it better fits this zone. It should be noted that the  $1/x$  fitted function slightly overestimates the gas velocity in the far field, which is not a problem since the production of interface area density is concentrated between 1.5 and 3.0  $D_1$ .

#### 4.3. Undeflected gas velocity

The gas velocity is reconstructed throughout the domain by employing the  $1/x$  decay law from Equation 35 and assuming the auto-similarity of the velocity profiles. This gas velocity reconstruction is performed without considering the presence of the liquid on the inner radius, making it equivalent to the undeflected gas velocity, as seen by the liquid during the atomization process, and denoted as  $u_{g,\text{rec}}$  at any position  $x$  and  $\eta$ :

$$u_{g,\text{rec}}(x, \eta) = e^{-\ln(2)\eta^2} \times (u_{\infty} + U_g \times K \times h_g/x). \quad (37)$$



	Round [29]	Plane [9]	Coaxial $1/x$	Coaxial $1/\sqrt{x}$
$u_\infty$ ( $m.s^{-1}$ )	0	0	1.15	-3.46
$K$	[5.8 : 6.0]	[2.5 : 3.5]	3.70	1.93

Table 3: Decay laws  $K$  and  $u_\infty$  coefficients from cylindrical, plane laws and fitted functions for coaxial gas jets

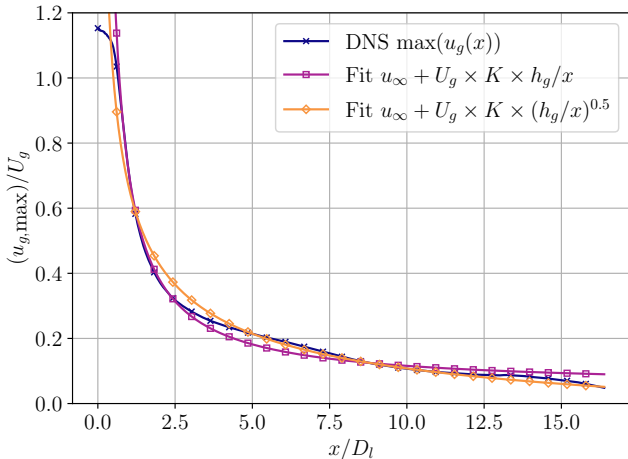


Figure 6: Gas velocity decay with fitted functions

Assuming that the local velocity  $u$  is equal to the liquid velocity  $u_l$  and reconstructing the undeflected gas velocity  $u_{g,rec}$  based on free jet considerations, the relative velocity  $\Delta V_{rec}$  used in the following sections of the paper, for the IAD model presented in Section 3, is given by:

$$\Delta V_{rec} = u_{g,rec} - u \quad (38)$$

The presented velocity decay law has been fitted to the DNS data in the current work. However, its closure is not expected to need adjustments for different regimes in the coaxial configuration. This hypothesis will need further testing and validation in future work.

## 5. IAD model validation

The following section focuses on validating the proposed numerical strategy for an LES simulation of the coaxial jet assisted atomization. The validation will be performed against the results of a DNS simulation from [21]. The full numerical model consists of Equation 19 and Equation 20 coupled to the multi-fluid model presented in Section 3 and consisting of the Equation 12. The simulation is carried on the LES-M9 mesh presented in Section 2.2 in the same conditions as the DNS (see Table 1), in a domain of size  $\{L_x, L_y, L_z\} = \{11 D_1, 6 D_1, 6 D_1\}$ .

The simulation was carried out for 36 ms physical time, close to the 30 ms for the DNS, allowing for full development of the primary atomization and convergence of the resolved/sub-grid interface area density fields.

### 5.1. Qualitative observations

Instantaneous cut fields in a plane perpendicular to the Z-axis, passing through the injection axis, can be seen Figure 7. The radius range extends from  $-1.0 D_1$  to  $1.0 D_1$  and covers the region from the back-plate to  $X = 10 D_1$ . The represented fields are the liquid volume fraction  $\alpha_l$ , the resolved, sub-grid and total components of the IAD from Equation 18 and Equation 19. The instantaneous  $\alpha_l$  field shows the section of the perturbed continuous liquid core and several detached liquid structures. It can be seen that the dense model on the current mesh is able to resolve the main liquid jet and its deformations, but it cannot resolve the smaller structures as the liquid is advected downstream, which are more and more diffused as the physics of atomization takes place and reduces the local structure size. The corresponding field of resolved IAD (in logarithmic scale) clearly shows the boundaries of the main liquid structures. Still, of course, it cannot recover the interface area of the unresolved liquid structures. It is on these under-resolved zones that the model activates, generating sub-grid interface area density. A notable distinction between the  $\Sigma_{res}$  and  $\Sigma'$  fields is that  $\Sigma_{res}$  is located on the outer boundary of the interface where liquid volume fraction is low, while the sub-grid IAD  $\Sigma'$  is also generated at higher liquid volume fractions. This characteristic arises from the diffuse interface modeling and would not be observed in methods employing sharp interface representations.

### 5.2. Liquid core validation

As stated in Section 2, the DNS results allow for a direct comparison of the LES and model outputs. To compare the results of the two simulations, time averages were performed on all the available time steps (except the initial transient), and azimuthal spatial averages were performed, assuming that the flow is mainly axisymmetric. The first quantitative validation is performed on the liquid field resolved by the dense phase solver. As visible in Figure 7 (a), the dense phase method can capture the continuous liquid jet extending to some 2–3 diameters from the injection. An estimation of the liquid breakup length, or intact core length, can be obtained from the average liquid phase function: a comparison of the average liquid volume fraction of the LES and the DNS is presented in Figure 8, for both the  $\alpha_l = 1$  and  $\alpha_l = 0.5$ . The DNS results show a shorter breakup length with both iso-contours, respectively at about  $1.5 D_1$  and  $2.2 D_1$ . Conversely, the diffuse interface model predicts around  $1.8 D_1$  for the first one and more than  $3.2 D_1$  for the second one: this result can be expected, as the sharp interface model and the finer mesh of the DNS allow for faster development of the interfacial instabilities. From this result, an atomization delay is expected from the LES simulation.

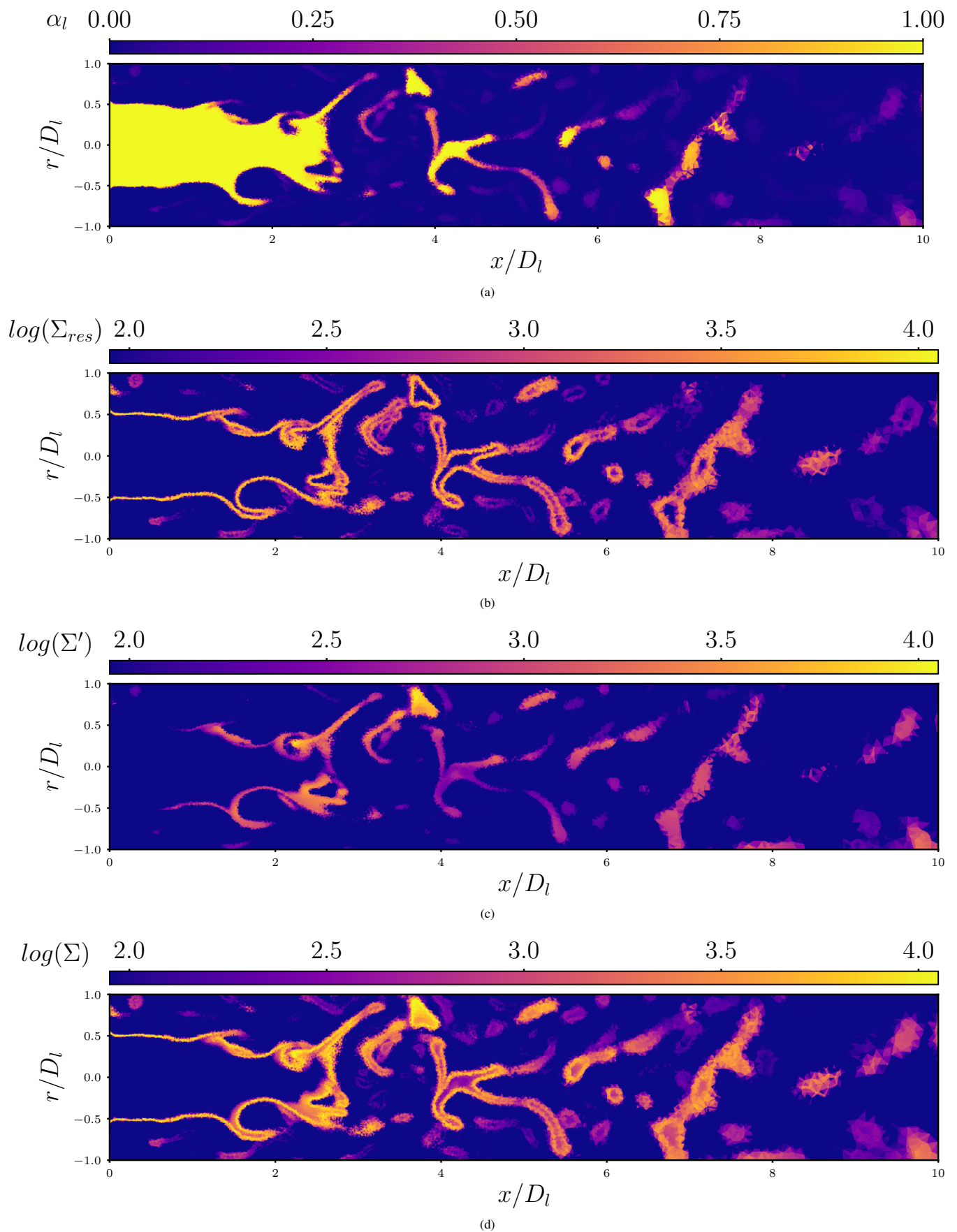


Figure 7: Instantaneous fields from LES using the IAD model. (a) Liquid volume fraction  $\alpha_l$ , (b) resolved IAD  $\Sigma_{res}$ , (c) sub-grid IAD  $\Sigma'$  and (d) total IAD  $\Sigma = \Sigma_{res} + \Sigma'$

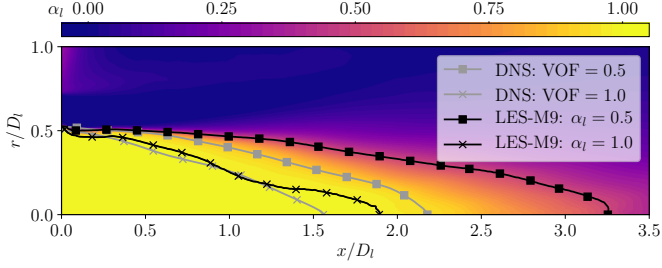


Figure 8: Liquid core length comparison between LES-M9 mesh and DNS

### 5.3. Mixing layer validation

To better understand this behavior, which may affect the effectiveness of the atomization model, the mixing layer thickness is investigated near the injection zone as a key quantity for assisted atomization. The mixing layer evolution involves the momentum exchange between the two streams and is affected by the difference in velocity and density of the two fluids. To calculate the mixing layer thickness, the radial distance between the positions of 99% of the maximum liquid and gas velocities on the time-averaged fields is measured. The results for the DNS and LES-M9 cases are shown in Figure 9, along with the corresponding linear regressions indicated by dashed lines. The growth of the mixing layer thickness exhibits a linear trend, highlighted by the regression lines.

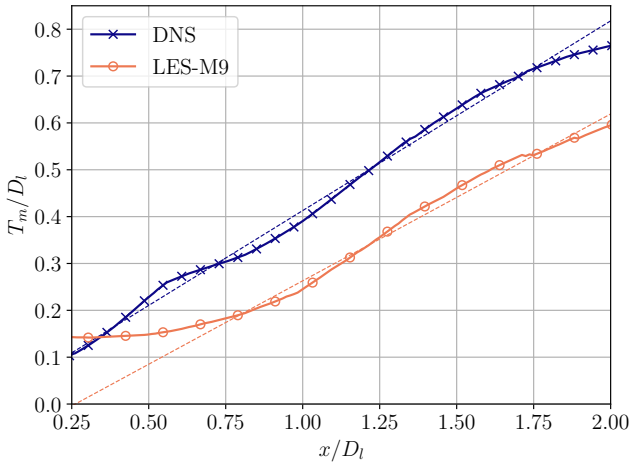


Figure 9: Mixing layer thickness evolution for both LES and DNS

As anticipated, the DNS consistently exhibits a thicker mixing layer than LES-M9 at the same streamwise location. Indeed, the LES thickness remains almost unchanged up to  $0.5 D_1$  from the backplate, while the linear behavior starts from  $0.25 D_1$  in the DNS. The LES thickness behavior becomes linear as well from about  $1 D_1$ , and it is interesting to see that the rate of expansion is very similar to the DNS: in other words, the mixing layer development is similar, but delayed by a constant of less than one diameter in the present simulation. This can be attributed to the filtering effect in LES, which delays the growth of vortices and the increase of the mixing layer thickness.

### 5.4. Interface area density validation

Figure 10 shows time and azimuthal average radial profiles of interface area density for both LES-M9 and DNS simulations at different streamwise locations  $X = \{1, 2, 3, 4\} D_1$ . The comparison with the DNS results is satisfactory, but the LES IAD field appears shifted toward the azimuthal direction compared to DNS. As shown in Section 5.2 and Section 5.3, the development of the two-phase flow in terms of liquid core and mixing layer presents a spatial delay of about  $0.75 D_1$  for the LES. In consequence, in Figure 11 and in all the following, the DNS profiles are compared to the LES ones located at a streamwise distance corrected by this offset, i.e.  $X_{LES} = X_{DNS} + \text{offset}$ , this offset being almost constant for the whole considered range of distances. Using this offset clearly improves the match between the total  $\Sigma$  over the DNS reference.

On Figure 11, the LES profiles are split into resolved interface area density  $\Sigma_{res}$  (from Equation 18), the model predicted  $\Sigma'$  (from Equation 19) and their sum  $\Sigma$ . Figure 11 (a) shows the profiles at one diameter from the backplate. Near the centerline, the DNS predicts almost zero interface area as this location is occupied by the round jet. A small increase in  $\Sigma_{res}$  indicates the presence of a diffuse interface, whose thickness increases with the distance. A peak in the DNS and  $\Sigma_{res}$  is visible near  $0.5 D_1$ , indicating a strong two-phase interaction and interface area production. In this zone, the model adds a small quantity of  $\Sigma'$ , which complements well the resolved one: the total  $\Sigma$  is almost superposed to the DNS values. A steep decrease of all the curves farther from the axis indicates a zone mostly occupied by gas only.

One diameter downstream, on Figure 11 (b), the DNS curve shows a larger peak but larger, as liquid deformation and detached structures are generated by primary atomization. The resolved  $\Sigma_{res}$  shows a similar behavior but with increasing magnitude, again with the modeled  $\Sigma'$  allowing the total interface area to match the DNS result. Interestingly, the model is able to correctly capture the small scales which make almost all the IAD for  $R = r/D_1 < 0.5 D_1$ , while for  $R > 0.5 D_1$  the resolved and modeled values contribute equally to the total area. A small spike is observed at  $R = 1.3 D_1$ , corresponding to accumulated liquid in the recirculation zone that gets atomized by the gas co-flow just out from the injector and is not observed on the DNS.

At  $X_{DNS} = 3 D_1$ , Figure 11 (c) shows more diffused profiles. For  $R < 0.4 D_1$ , the total LES IAD is slightly underestimated, while it continues to match very well the DNS one up to  $R = 1$ . At larger radial distances, there seems to be a small overestimation given by the presence of modeled  $\Sigma'$  summing up to an already matching  $\Sigma_{res}$ .

Finally, Figure 11 (d) exhibits similar results to Figure 11 (c); however, the slight overestimation observed far from the injection axis is now present across all radii. This highlights a limitation of the current formulation, which focuses solely on the mechanisms of interface creation and does not account for those of interface destruction.

Overall, the results obtained by the LES plus IAD model are very satisfying, given the difficulty of the task and the number of terms playing a role in the relatively simple modeling of

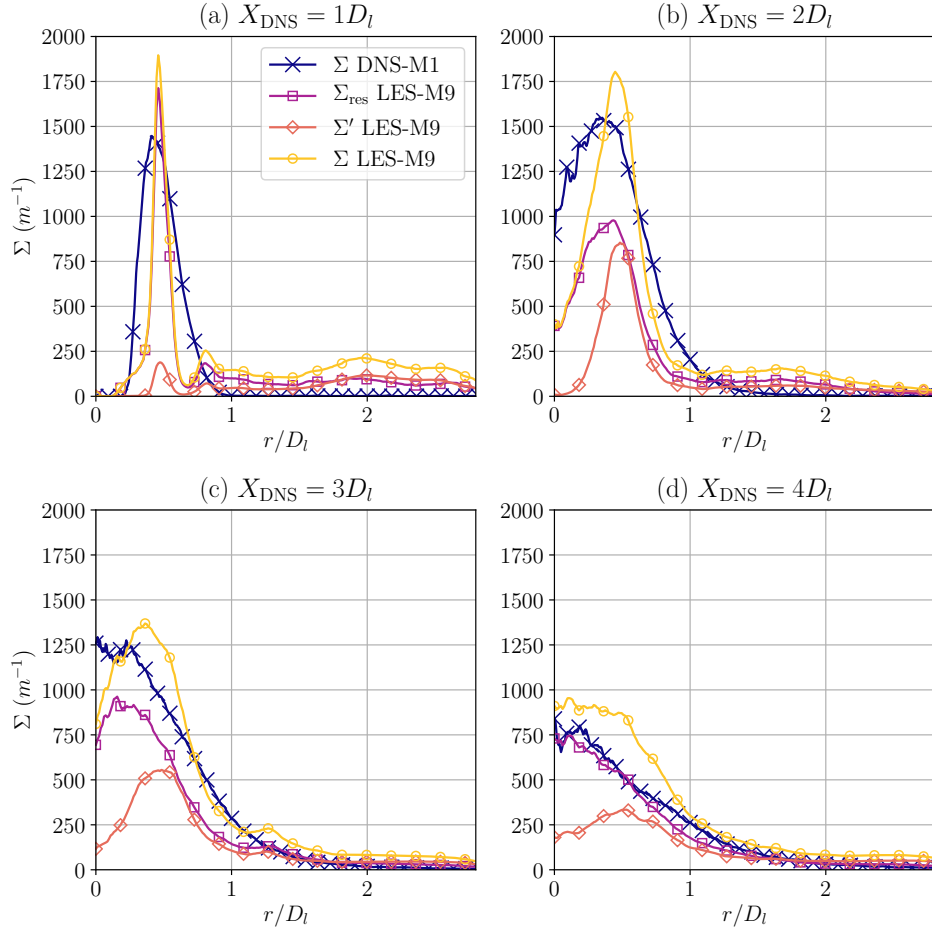


Figure 10: Interface area density profiles at positions  $X = 1, 2, 3, 4 D_1$  for the DNS and the LES with the IAD model of this paper at  $We_{cr} = 3.5$

Equation 19. To increase the confidence in the model, a study on its sensitivity to the most relevant parameters and the LES mesh size was conducted. The results are presented in the next section.

## 6. Mesh convergence and model sensibility

### 6.1. Mesh convergence

The proposed numerical method works assuming that the dense phase model and the IAD model can respectively deal with the large two-phase scales of the flow and the sub-grid scales, mostly corresponding to the dispersed phase. The primary filter, which splits the large and small scales, is the LES mesh size. Ideally, an unrestricted mesh refinement would lead the dense phase model to provide a DNS-accurate solution of the flow, where  $\Sigma_{res}$  IAD accounts for the total interface area; conversely, a very coarse mesh would give a very badly resolved interface area, forcing the model to reconstruct small and large scales. In practice, there is no proof that the diffuse interface model would converge to the DNS solution; however, convergence on the resolved large scales together with the expected behavior of the model would be sufficient to rebuild a good approximation of the liquid interface area density.

The main assumption made in the building of the model is that the dense phase solver is able to solve at least the largest scales involved in the jet's primary atomization, such as the intact liquid jet, its interface surface waves, and the largest ligaments (see Figure 3 and Figure 7 (a)). This solution gives the model appropriate local data, such as the liquid velocity. It is evident that different LES mesh resolutions would change the quality of the dense phase solution and the relative model contribution.

Several simulations with different LES mesh resolutions were carried out to characterize this effect better, keeping the same  $We_{cr}$ , and compared in terms of IAD to the reference DNS. Figure 12 shows the same IAD time and space averaged radial profiles at different streamwise positions for the DNS and the three meshes described in Section 2.2. The plots show an excellent agreement of the total IAD for the three LES meshes M5, M9 and M20, showing the capability of the model to adapt to the local dense phase resolution, adapting the balance. Some differences can be seen at the very initial peak at  $X_{DNS} = 1 D_1$ , and downstream at  $X_{DNS} = 4 D_1$ . To further assess the behavior of the model as a function of spatial resolution, the ratio of modeled IAD to total IAD is compared in Figure 13. Here, it can be seen that the modeled part of the IAD decreases with mesh

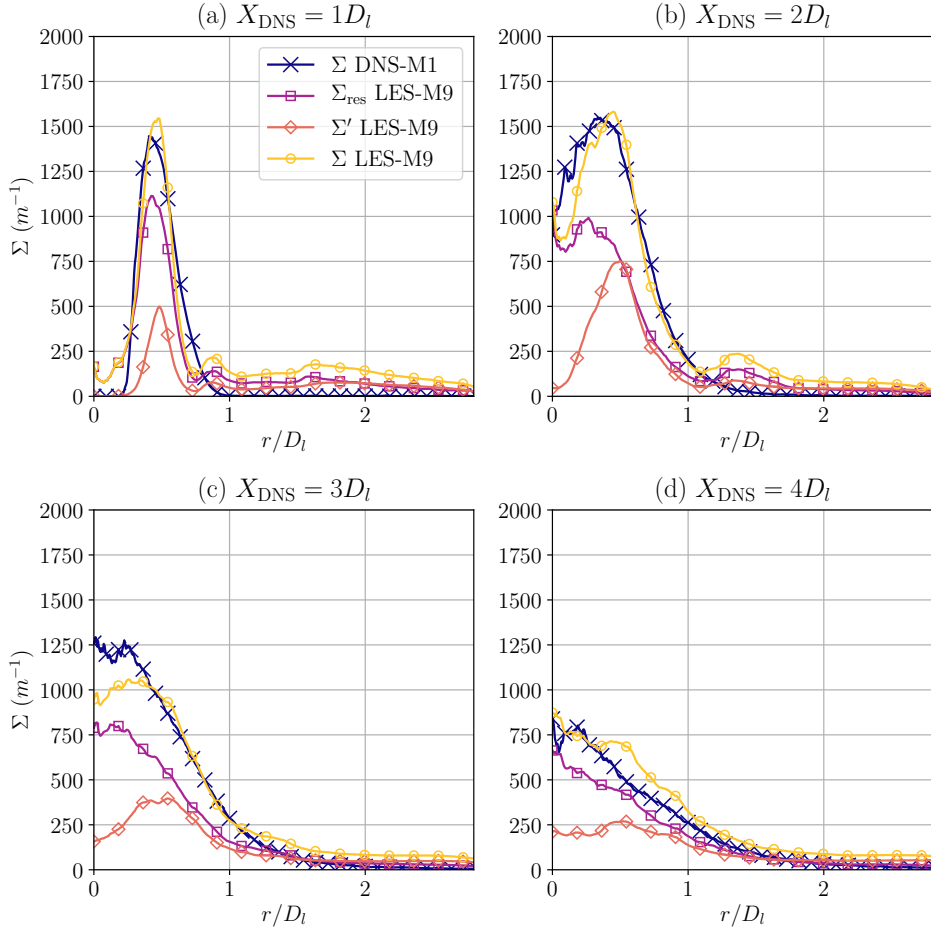


Figure 11: Interface area density profiles at positions  $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4 D_l$  for the DNS and at corresponding positions corrected by the offset for the LES with the IAD model of this paper at  $We_{\text{cr}} = 3.5$

refinement. This confirms the good trend of the model, which generates decreasing sub-mesh IAD as the mesh is refined.

## 6.2. Critical Weber Number

The critical Weber number described in Section 3.2 plays a key role in the evaluation of the local smallest allowable liquid scale  $\Sigma'_{\text{cr}}$ , defined in Equation 28. In consequence, the sensitivity of the IAD model to the choice of the critical Weber number is investigated in this section. The IAD profiles obtained from LES simulations with different values of  $We_{\text{cr}} = \{1, 3, 4, 5, 7\}$  are compared to the DNS  $\Sigma$  profiles at positions  $X_{\text{DNS}} = \{1, 2, 3, 4\} D_l$  in Figure 14. This analysis aims to assess the impact of varying  $We_{\text{cr}}$  on the accuracy of the IAD predictions.

The IAD model with  $We_{\text{cr}} = \{3, 4, 5, 7\}$  shows a good agreement with the DNS results in this configuration. As expected, a higher  $We_{\text{cr}}$  leads to lower values of  $\Sigma$  on average. This is because a higher  $We_{\text{cr}}$  implies that the atomized structures stabilize at higher Weber numbers and, therefore, stop creating interface at higher relative velocities. Among the tested  $We_{\text{cr}}$  values, the largest one ( $We_{\text{cr}} = 7$ ) shows still close agreement

to DNS, with only about a 20% underestimation at the worst position ( $X_{\text{DNS}} = 3 D_l$ ). On the other hand, the choice of  $We_{\text{cr}} = 1$  leads to a significant overestimation of  $\Sigma$ . These findings indicate that the IAD model exhibits relatively low sensitivity to the critical Weber number, as long as it is chosen carefully within an appropriate range, preferably overestimated rather than underestimated, such as  $We_{\text{cr}}$  values between 3 and 7. Additionally, the critical Weber number values observed by Averseng [2] on periodical planar liquid sheets, falling within the range of 2 to 4, provide further support for the chosen  $We_{\text{cr}}$  value in this paper.

## 7. Conclusion

This paper has presented a comprehensive study on the modeling of coaxial two-phase flows. The proposed approach is based on coupling a diffuse interface dense solver and a sub-grid interface area density model to characterize all the relevant scales of the liquid jet assisted atomization. The model has been successfully validated through comparisons with high-fidelity DNS data from Hoarau et al. [21], producing very accurate



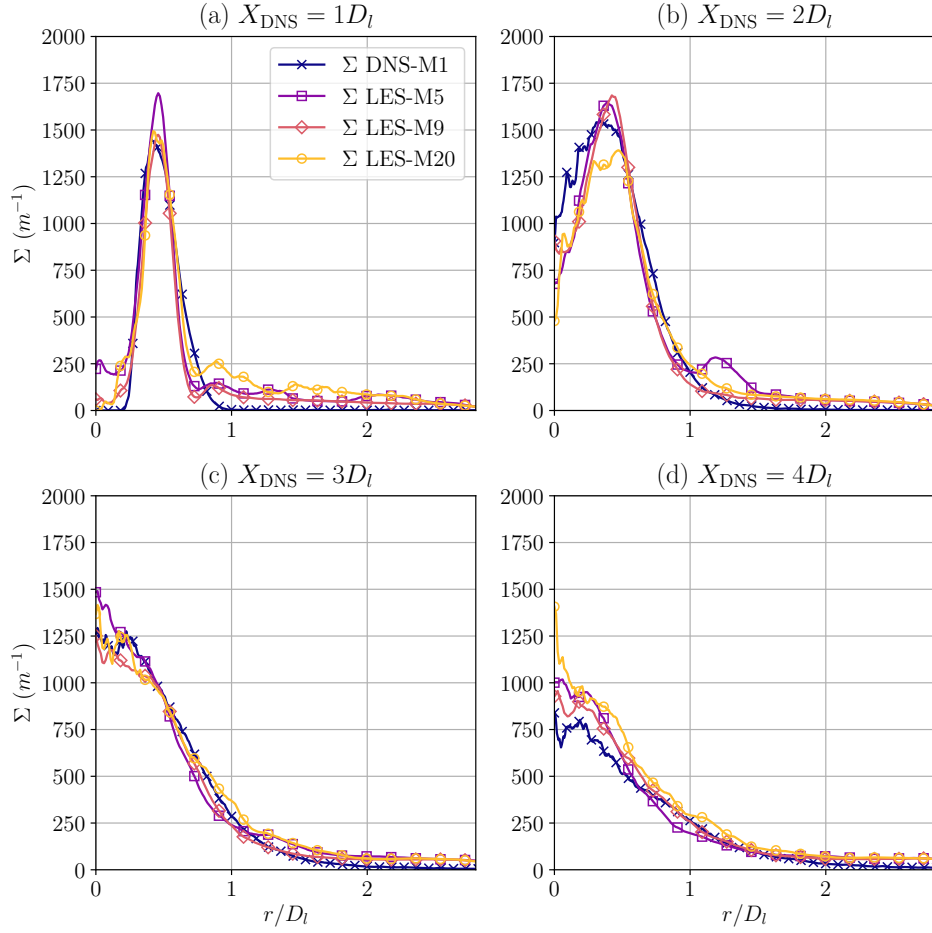


Figure 12: LES-M5, LES-M9, LES-M20, DNS IAD profiles at positions  $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4 D_l$  for the DNS and at corresponding positions corrected by offsets for LES with  $We_{\text{cr}} = 3.5$

results for several mesh sizes, thus adapting to the resolution given by the dense phase solver.

Based on Chesnel et al. [10] initial work on IAD applied to Diesel jets, the proposed formulation is adapted to the physics encountered in coaxial jets typically found in LRE. Unlike the mechanical atomization observed in Diesel jets, the atomization in coaxial injectors is primarily driven by the shearing of the liquid by the high-velocity gas, known as assisted atomization. This fundamental difference in the atomization mechanism necessitates the development of a new modeling approach to capture the creation of the interface in this specific application. The model formulation considers several terms related to atomization location, frequency, magnitude, local critical droplet size, and mesh dependence. In the proposed modeling, as the dense phase equilibrium model could not give accurate local liquid and gas velocities, a dedicated modeling of the local liquid/gas relative velocity was proposed and successfully incorporated into the IAD model. It is worth noting that the model could be simplified by directly using both liquid and gas velocities from the Baer-Nunziato 7-equation model, thereby eliminating the need to explicitly model the relative velocity.

A critical Weber number estimates the local equilibrium be-

tween surface tension and shearing stress, thus stopping the interface production. In the studied configuration, a  $We_{\text{cr}}$  value of 3.5 demonstrates the best agreement with the reference DNS data in the primary atomization region. Unsurprisingly, this finding deviates from the prediction of Pilch and Erdman [38], mainly due to the non-spherical nature of atomized structures and the complexity of the turbulent flow produced during primary atomization. Nonetheless, the IAD model exhibits a relatively low sensitivity to the choice of the critical Weber number, as excellent agreements with the reference are achieved within the range of 3 to 7. This favorable characteristic of the model encourages its application in other configurations where reference results are not available, provided that  $We_{\text{cr}}$  values close to those determined in this study are selected.

The IAD holds potential for various applications. Firstly, it can be directly employed as an estimation of the interface area of the two-phase full jet, facilitating its evaporation in dense-phase Navier-Stokes solvers. Another application involves using the IAD to define the drop Sauter diameter  $D_{32}$  for coupling with LES Eulerian or Lagrangian dispersed phase solvers, as discussed in [26]. This coupling enables the incorporation of droplet dynamics and interactions, crucial in simulating dis-

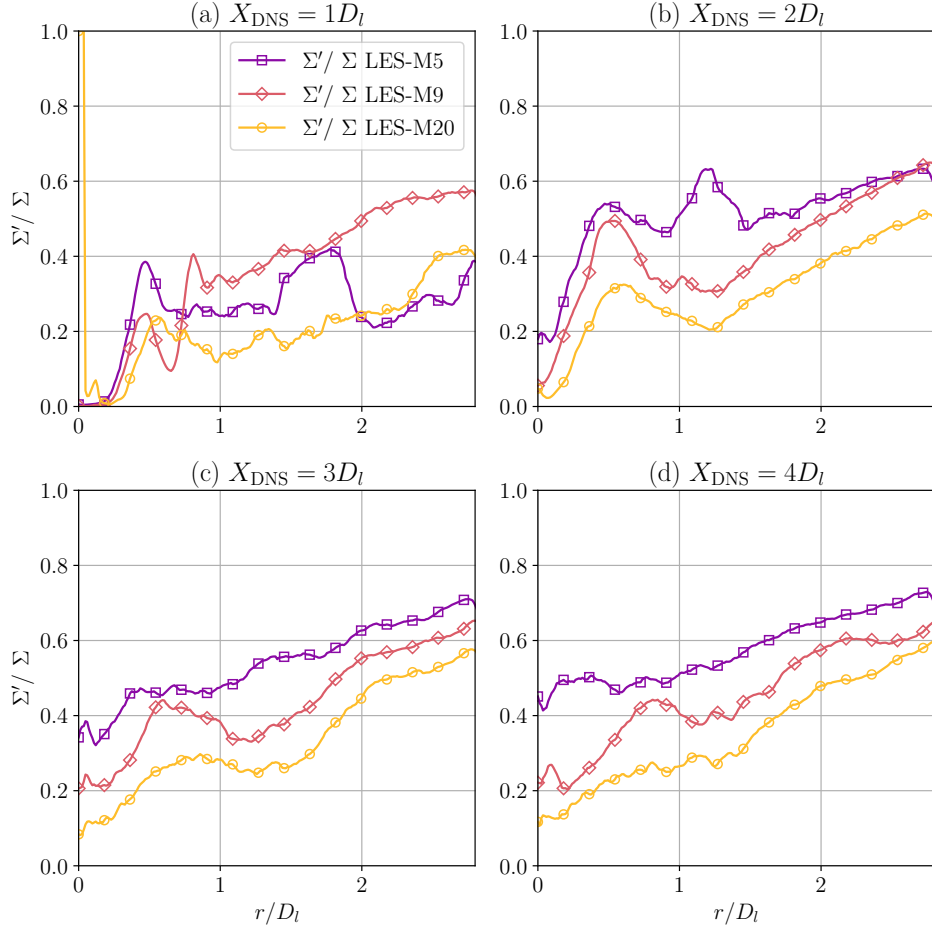


Figure 13: LES-M5, LES-M9, LES-M20 profiles of  $\Sigma'$  over total  $\Sigma$  ratio at positions  $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4 D_t$  positions corrected by offsets with  $We_{\text{cr}} = 3.5$

persed phase phenomena in multiphase flows [40].

Finally, the proposed modeling approach was specifically applied to the fiber regime of assisted atomization. It is important to note that the formulation of the model can be extended to other regimes of assisted atomization and other configurations, such as jets in cross-flow. The underlying framework of the model can describe the full range of Weber numbers, which encompass various atomization regimes. However, the general applicability of the IAD sub-grid model requires additional validations. In particular, the applicability of the free jet law, which is contingent upon specific initial conditions and assumed configuration-independent coefficients, needs to be thoroughly investigated.

## 8. Acknowledgments

This work was granted by a PhD grant from CNES (Centre National d'Etudes Spatiales) and ONERA (Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales). For the purpose of Open Access, a CC-BY public copyright license has been applied by the authors to the present document and will be applied to all subsequent versions up to the author-accepted manuscript arising from this submission.

## Appendix A. Sensibility on $\lambda_{\text{atom}}$

This appendix presents a parametric study that investigates the influence of the coefficients  $a_\lambda$  and  $b_\lambda$  of the  $\lambda_{\text{atom}}$  function in the IAD model. Table A.4 provides details of the parameter variations, while Figure A.15 displays the resulting functions. The coefficients  $a_\lambda$  and  $b_\lambda$  control the shape and behavior of the  $\lambda_{\text{atom}}$  function, which determines the location of IAD creation. Modifying these coefficients allows us to explore different scenarios and assess their impact on the model predictions.

	$\lambda_{\text{atom } 1}$	$\lambda_{\text{atom } 2}$	$\lambda_{\text{atom } 3}$	$\lambda_{\text{atom } 4}$
$X_{\text{atom}}$	2.14	2.14	1.79	2.32
$\lambda_{\text{atom}}(X_{\text{atom}})$	0.9	0.99	0.9	0.9
$b_\lambda$	5.0	10.0	5.0	5.0
$a_\lambda$	1.70	1.68	1.35	1.88

Table A.4: Parameters for the atomization location function  $\lambda_{\text{atom}}$

In Figure A.16, the IAD profiles at positions  $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4 D_t$  on both DNS and LES-M9 meshes are plotted for the different

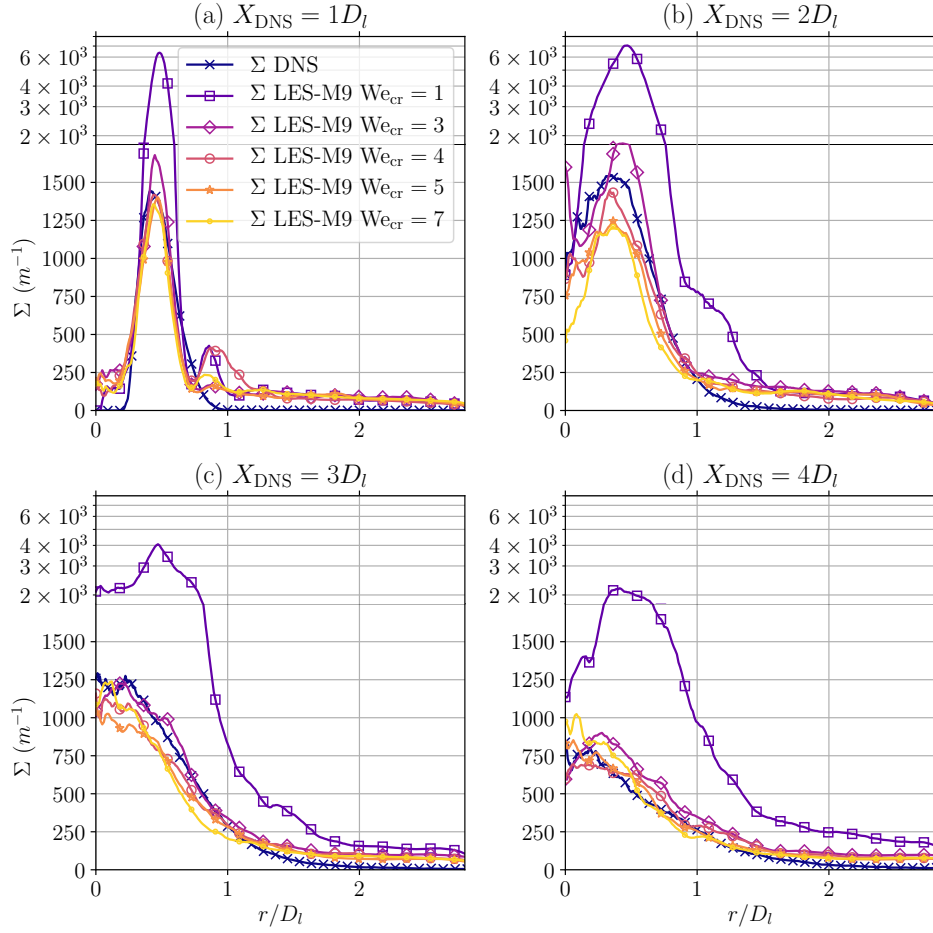


Figure 14: Interface area density profiles at positions  $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4 D_l$  for the DNS and at corresponding positions corrected by the offset for the LES with  $We_{\text{cr}} = 1, 3, 4, 5, 7$  on the LES-M9 mesh

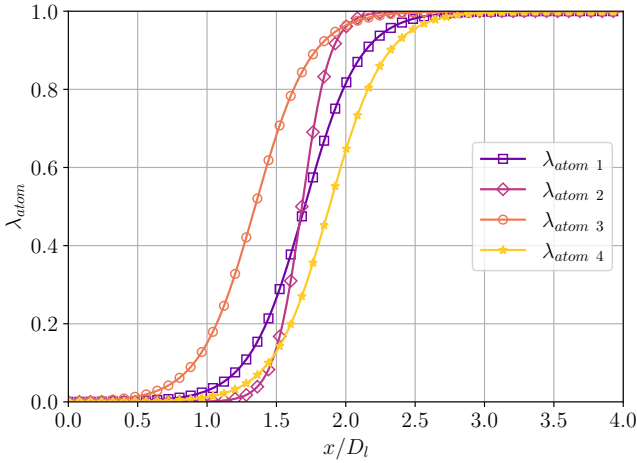


Figure A.15: Atomization location function  $\lambda_{\text{atom}}$  for several parameters  $a_l, b_l$

$\lambda_{\text{atom}}$  functions previously defined. Except for the  $\lambda_{\text{atom } 3}$  function, the other functions provide consistent results. The  $\lambda_{\text{atom } 3}$  function underestimates the position of IAD creation due to a

relatively low  $b_l$  coefficient, leading to a significant discrepancy between the predicted IAD production and the DNS results. It induces the production of IAD much closer to the backplate than observed on the DNS, in a zone where the velocity gradient between the gas and the liquid is very high. This induces a large overestimation of the IAD production. On the other hand, the  $\lambda_{\text{atom } 4}$  function has been chosen to study the impact of a slight overestimation of the  $X_{\text{atom}}$  parameter. This function exhibits a maximum underestimation of the IAD production of approximately 10%.

These findings highlight the sensitivity of the IAD model to the choice of the  $\lambda_{\text{atom}}$  function and the importance of accurately determining the position of IAD creation for reliable predictions.

## References

- [1] S.V. Apte, K. Mahesh, P. Moin, and J.C. Oefelein. Large-eddy simulation of swirling particle-laden flows in a coaxial-jet combustor. *International Journal of Multiphase Flow*, 29(8):1311–1331, 2003. ISSN 0301-9322. doi: [https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(03\)00104-6](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(03)00104-6). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932203001046>.



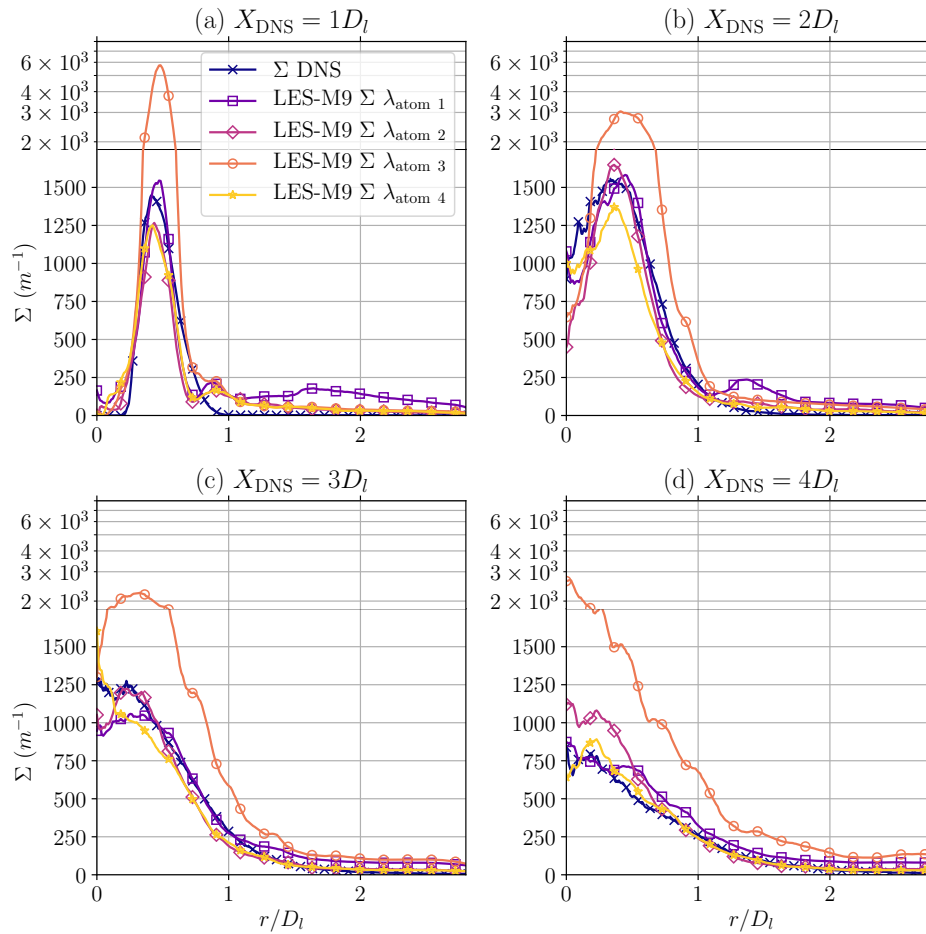


Figure A.16: Interface area density profiles at positions  $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4 D_l$  for the DNS and at corresponding positions corrected by the offset for LES-M9 mesh for several  $\lambda_{\text{atom}}$  functions defined in Table A.4 with  $We_{\text{cr}} = 3.5$

- [2] M. Averseng. *Contribution à la modélisation de l'atomisation assistée par analyse de simulations haute fidélité*. PhD thesis, Toulouse University, 2022.
- [3] H. B. Awbi. *Ventilation of Buildings*. Routledge, 2003. ISBN 9780415270564.
- [4] M. R. Baer and J. W. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6):861–889, 1986. ISSN 03019322. doi: 10.1016/0301-9322(86)90033-9.
- [5] F. Baillot, J.-B. Blaisot, G. Boisdron, and C. Dumouchel. Behaviour of an air-assisted jet submitted to a transverse high-frequency acoustic field. *Journal of Fluid Mechanics*, 640:305–342, 2009. doi: 10.1017/S002211200999139X.
- [6] P. A. Beau, T. Ménard, R. Lebas, A. Berlemont, S. Tanguy, and F. X. Demoulin. Numerical jet atomization. Part II: modeling information and comparison with DNS results. In *7th International Symposium on numerical methods for multiphase flows*, 2006. ISBN 0791847500. doi: 10.1115/fedsm2006-98166.
- [7] G. Blanchard. *Modélisation et simulation multi-échelles de l'atomisation d'une nappe liquide cisailée*. PhD thesis, Toulouse University, 2015.
- [8] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, 1992. ISSN 10902716. doi: 10.1016/0021-9991(92)90240-Y.
- [9] G. Cao, C. Kandzia, D. Müller, J. Heikkinen, R. Kosonen, and Mika Ruponen. Experimental study of the effect of turbulence intensities on the maximum velocity decay of an attached plane jet. *Energy and Buildings*, 65:127–136, 2013. ISSN 03787788. doi: 10.1016/j.enbuild.2013.05.041.
- [10] J. Chesnel, J. Reveillon, T. Ménard, and F. X. Demoulin. Large eddy simulation of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, 21(9):711–736, 2011. ISSN 10445110. doi: 10.1615/AtomizSpr.2012003740.
- [11] A. Chiapolino, P. Boivin, and R. Saurel. A simple and fast phase transition relaxation solver for compressible multicomponent two-phase flows. *Computers and Fluids*, 150:31–45, 2017. ISSN 00457930. doi: 10.1016/j.compfluid.2017.03.022.
- [12] N. Chigier and Z. Farago. Morphological Classification of Disintegration of Round Liquid Jets in a Coaxial Air Stream. *Atomization and Sprays*, 2(2):137–153, 1992. ISSN 1044-5110. doi: 10.1615/atomizspr.v2.i2.50.
- [13] B. Déjan. *Etude expérimentale de l'atomisation d'une nappe liquide avec et sans zone de pré-film en vue de sa modélisation - Influence des conditions limite*. PhD thesis, 2016.
- [14] B. Duret, J. Reveillon, T. Menard, and F. X. Demoulin. Improving primary atomization modeling through DNS of two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 55:130–137, 2013. ISSN 03019322. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.05.004.
- [15] N. Fdida and J. B. Blaisot. Drop size distribution measured by imaging: Determination of the measurement volume by the calibration of the point spread function. *Measurement Science and Technology*, 21(2), 2010. ISSN 13616501. doi: 10.1088/0957-0233/21/2/025501.
- [16] N. Fdida, L. Vingert, Y. Mauriot, L. H. Dorey, and M. Théron. Comparison of LOX / Methane and LOX / Hydrogen cryogenic spray combustion with simultaneous optical diagnostics. *Eucass 2019*, pages 2–11, 2019. doi: 10.13009/EUCASS2019-862.
- [17] V. G. Fernández, G. Lavergne, and P. Berthoumieu. Dynamic primary atomization characteristics in an airblast atomizer, high pressure condi-

- tions. *Atomization and Sprays*, 21(1):17–29, 2011. ISSN 10445110. doi: 10.1615/AtomizSpr.v21.i1.20.
- [18] A. Ficuciello, J. B. Blaisot, C. Richard, and F. Baillot. Investigation of air-assisted sprays submitted to high frequency transverse acoustic fields: Droplet clustering. *Physics of Fluids*, 29(6):1–17, 2017. ISSN 10897666. doi: 10.1063/1.4985202.
- [19] D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows. *Journal of Computational Physics*, 152:423–456, 1999. URL <http://www.idealibrary.comon>.
- [20] J. O. Hinze. Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes. *AIChE Journal*, 1(3):289–295, 1955. ISSN 15475905. doi: 10.1002/aic.690010303.
- [21] J. C. Hoarau, L. H. Dorey, D. Zuzio, F. Granger, and J. L. Estivalèzes. Direct numerical simulation of a subcritical coaxial injection in fiber regime using sharp interface reconstruction. *International Journal of Multiphase Flow*, (to be submitted). URL <https://hal.science/hal-04212765>.
- [22] S. Jay, F. Lacas, and S. Candel. Combined surface density concepts for dense spray combustion. *Combustion and Flame*, 144(3):558–577, 2006. ISSN 00102180. doi: 10.1016/j.combustflame.2005.07.017.
- [23] C. Larricq-Fourcade. *Etude de la pulvérisation assistée en air d'une nappe liquide et influence d'un vent ionique sur les instabilités hydrodynamiques*. PhD thesis, 2006.
- [24] 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, 2000. doi: 10.1146/annurev.fluid.32.1.275. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.32.1.275>.
- [25] C. Le Touze and N. Rutard. Numerical methods for diffuse interface multifluid models. In *ECCOMAS*, pages 1–12, 2022.
- [26] C. Le Touze, L. H. Dorey, N. Rutard, and A. Murrone. A compressible two-phase flow framework for Large Eddy Simulations of liquid-propellant rocket engines. *Applied Mathematical Modelling*, 84:265–286, 2020. ISSN 0307904X. doi: 10.1016/j.apm.2020.03.028.
- [27] 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, 2009. ISSN 03019322. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2008.11.005.
- [28] Nathanaël Machicoane, Rodrigo Osuna-Orozco, and Alberto Aliseda. Regimes of the length of a laminar liquid jet fragmented by a gas co-flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 165:104475, 2023. ISSN 0301-9322. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2023.104475>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932223000964>.
- [29] T. G. Malmström, A. T. Kirkpatrick, B. Christensen, and K. D. Knappmiller. Centreline velocity decay measurements in low-velocity axisymmetric jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 346:363–377, 1997. ISSN 00221120. doi: 10.1017/S0022112097006368.
- [30] A. Mansour and N. Chigier. Disintegration of liquid sheets. *Physics of Fluids A*, 2(5):706–719, 1990. ISSN 08998213. doi: 10.1063/1.857724.
- [31] F.E. Marble and J.E. Broadwell. The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reactions. Technical report, Purdue University, 1977.
- [32] P. Marmottant and E. Villermaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, 498(498):73–111, 2004. ISSN 00221120. doi: 10.1017/S0022112003006529.
- [33] C. Morel. On the surface equations in two-phase flows and reacting single-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(10):1045–1073, 2007. ISSN 03019322. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.02.008.
- [34] T. Müller, A. Sängler, P. Habisreuther, T. Jakobs, D. Trimis, T. Kolb, and N. Zarzalis. Simulation of the primary breakup of a high-viscosity liquid jet by a coaxial annular gas flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 87:212–228, 2016. ISSN 0301-9322. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2016.09.008>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932215301956>.
- [35] F. Nicoud, H. B. Toda, O. Cabrit, S. Bose, and J. Lee. Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations. *Physics of Fluids*, 23(8), 2011. ISSN 10706631. doi: 10.1063/1.3623274.
- [36] Nicolas Odier, Guillaume Balarac, and Christophe Corre. Numerical analysis of the flapping mechanism for a two-phase coaxial jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 106:164–178, 2018. ISSN 0301-9322. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2018.05.028>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932218300296>.
- [37] P. J. O'Rourke and A. A. Amsden. The TAB method for numerical calculation of spray droplet breakup. In *International Fuels nad Lubricants Meeting and Exposition*, Toronto, 1987.
- [38] 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, 1987. ISSN 03019322. doi: 10.1016/0301-9322(87)90063-2.
- [39] William E. Ranz. Some experiments on orifice sprays. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 36(4):175–181, 1958. ISSN 1939019X. doi: 10.1002/cjce.5450360405.
- [40] N. Rutard, L. H. Dorey, C. Le Touze, and S. Ducruix. Large-eddy simulation of an air-assisted liquid jet under a high-frequency transverse acoustic forcing. *International Journal of Multiphase Flow*, 122:103144, 2020. ISSN 03019322. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2019.103144.
- [41] K. A. Sallam, C. Aalburg, and G. M. Faeth. Breakup of round nonturbulent liquid jets in gaseous crossflow. *AIAA Journal*, 42(12):2529–2540, 2004. ISSN 00011452. doi: 10.2514/1.3749.
- [42] L. Schiller and Z. Naumann. A drag Coefficient Correlation. *VDI Zeitung*, 77:318–320, 1935.
- [43] J. M. Senoner, M. Sanjosé, T. Lederlin, F. Jaegle, M. García, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, H. Pitsch, and T. Poinso. Eulerian and Lagrangian Large-Eddy Simulations of an evaporating two-phase flow. *C. R. Mécanique*, 337(6-7):458–468, 2009. ISSN 1631-0721. doi: 10.1016/j.crme.2009.06.002.
- [44] A. Vallet and R. Borghi. Modélisation eulerienne de l'atomisation d'un jet liquide. *Comptes Rendus de l'Académie de Sciences - Serie IIb: Mécanique, Physique, Chimie, Astronomie*, 327(10):1015–1020, 1999. ISSN 12874620. doi: 10.1016/S1287-4620(00)87013-1.
- [45] 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):619–642, 2001. ISSN 10445110. doi: 10.1615/atomizspr.v11.i6.20.
- [46] Lam Vu, Nathanaël Machicoane, Danyu Li, Timothy B. Morgan, Theodore J. Heindel, Alberto Aliseda, and Olivier Desjardins. A computational study of a two-fluid atomizing coaxial jet: Validation against experimental back-lit imaging and radiography and the influence of gas velocity and contact line model. *International Journal of Multiphase Flow*, 167:104520, 2023. ISSN 0301-9322. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2023.104520>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932223001416>.
- [47] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computer in Physics*, 12(6):620–631, 11 1998. ISSN 0894-1866. doi: 10.1063/1.168744. URL <https://doi.org/10.1063/1.168744>.
- [48] P. K. Wu, K. A. Kirkendall, R. P. Fuller, and A. S. Nejad. Breakup processes of liquid jets in subsonic crossflows. *Journal of Propulsion and Power*, 13(1):1–14, 1996. doi: 10.2514/6.1996-3024.
- [49] F. Xiao, M. Dianat, and J. J. McGuirk. LES of turbulent liquid jet primary breakup in turbulent coaxial air flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 60:103–118, 2014. ISSN 03019322. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.11.013. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.11.013>.
- [50] Feichi Zhang, Thorsten Zirwes, Thomas Müller, Simon Wachter, Tobias Jakobs, Peter Habisreuther, Nikolaos Zarzalis, Dimosthenis Trimis, and Thomas Kolb. Effect of elevated pressure on air-assisted primary atomization of coaxial liquid jets: Basic research for entrained flow gasification. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 134:110411, 2020. ISSN 1364-0321. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110411>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032120306973>.
- [51] Feichi Zhang, Simon Wachter, Thorsten Zirwes, Tobias Jakobs, Nikolaos Zarzalis, Dimosthenis Trimis, Thomas Kolb, and Dieter Stapf. Effect of nozzle upscaling on coaxial, gas-assisted atomization. *Physics of Fluids*, 35(4):043302, 04 2023. ISSN 1070-6631. doi: 10.1063/5.0141156. URL <https://doi.org/10.1063/5.0141156>.



## Champs du couplage SPS-DPS

Cette annexe présente les champs instantanés issus du couplage entre le SPS et le DPS par la densité d'aire interfaciale représenté sur la Figure B.1. Le débit d'atomisation et la fraction volumique de gouttes par classe générés sont représentés respectivement sur la Figure B.2 et la Figure B.3.

### B.1. Densité d'aire interfaciale

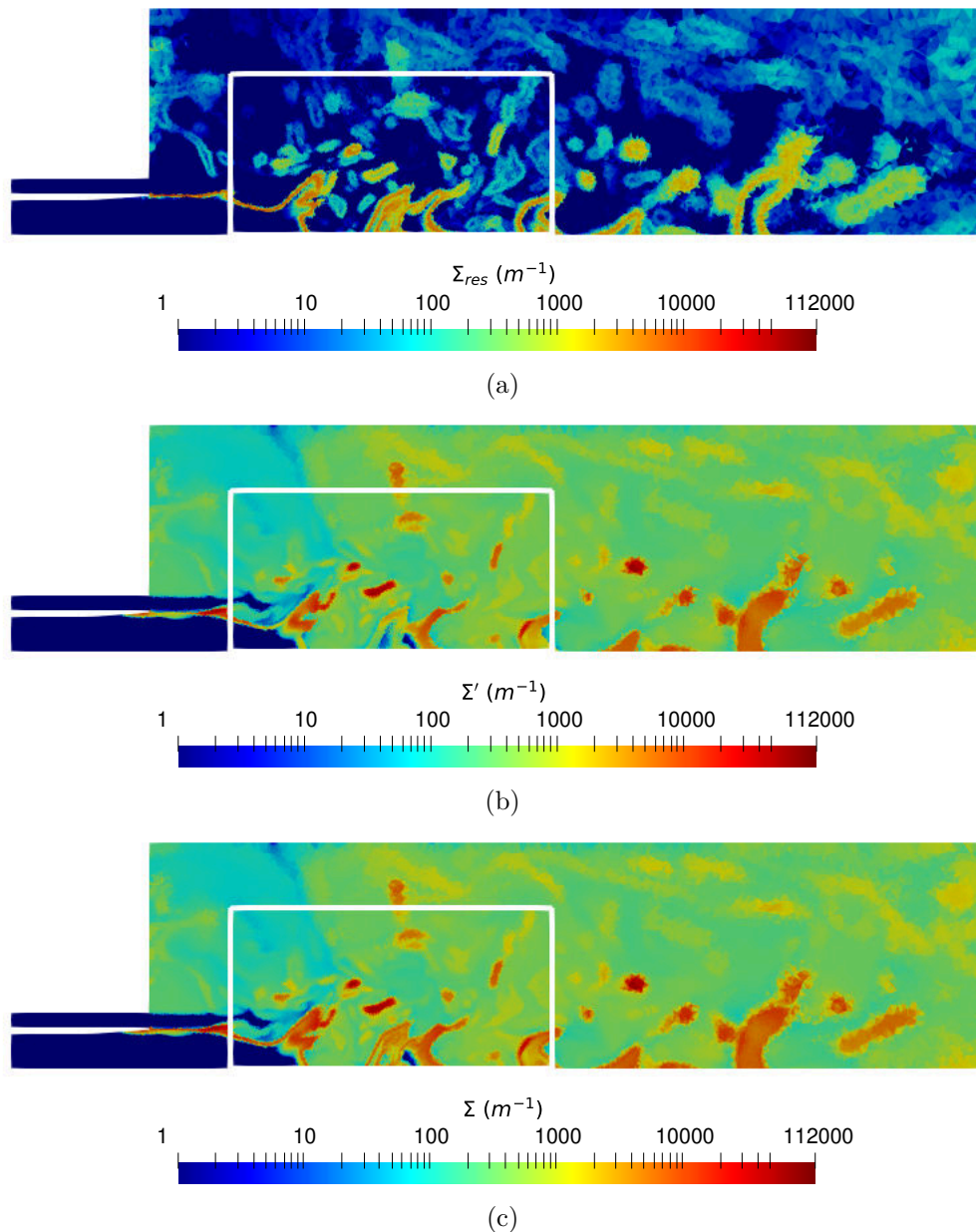


FIGURE B.1. – Champs instantanés de densité d'aire interfaciale (a) résolue  $\Sigma_{res}$ , (b) transporté de sous-maille  $\Sigma'$  et (c) totale  $\Sigma$

## B.2. Débit d'atomisation par classe

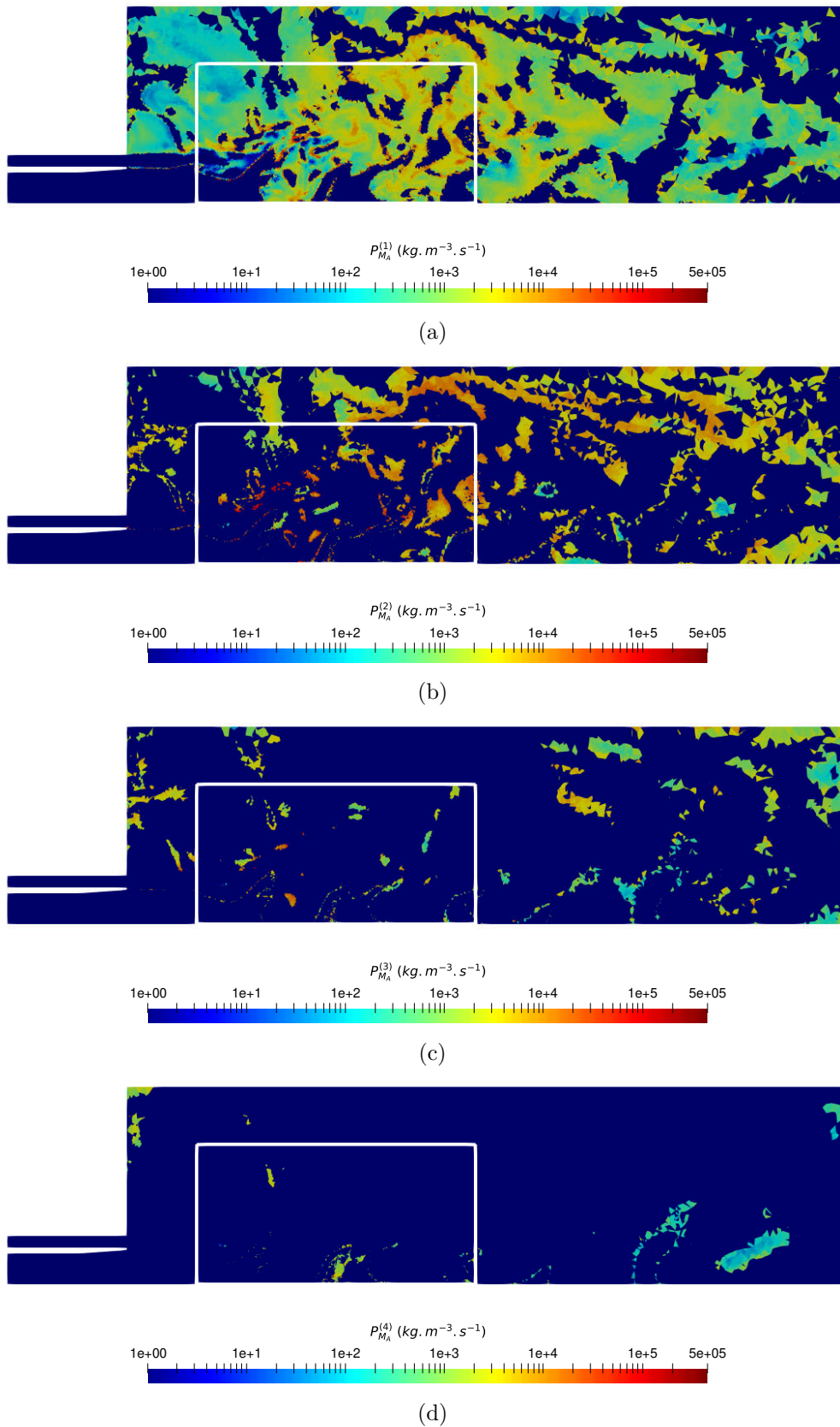
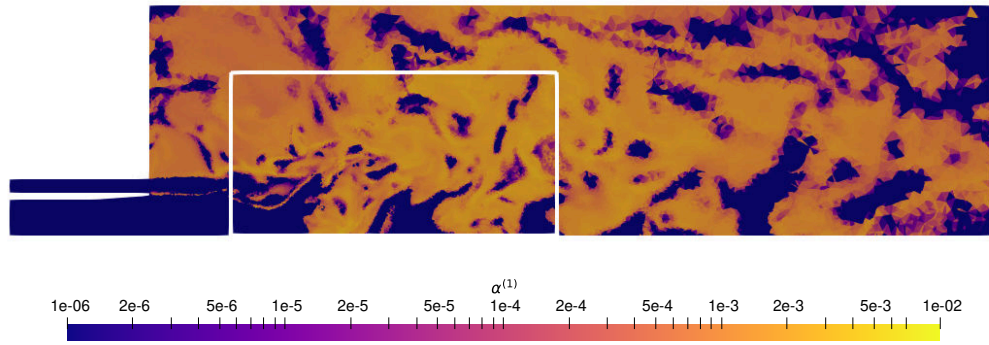
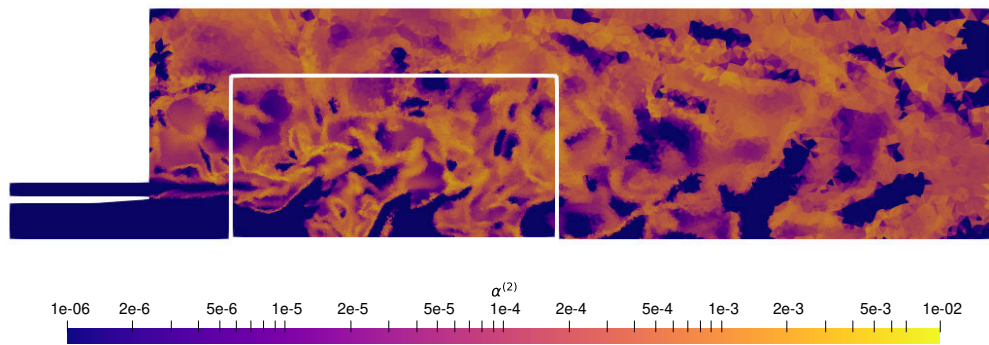


FIGURE B.2. – Champs instantanés de débits d'atomisation par classe, (a)  $I_S^{(1)}$ , (b)  $I_S^{(2)}$ , (c)  $I_S^{(3)}$ , (d)  $I_S^{(4)}$

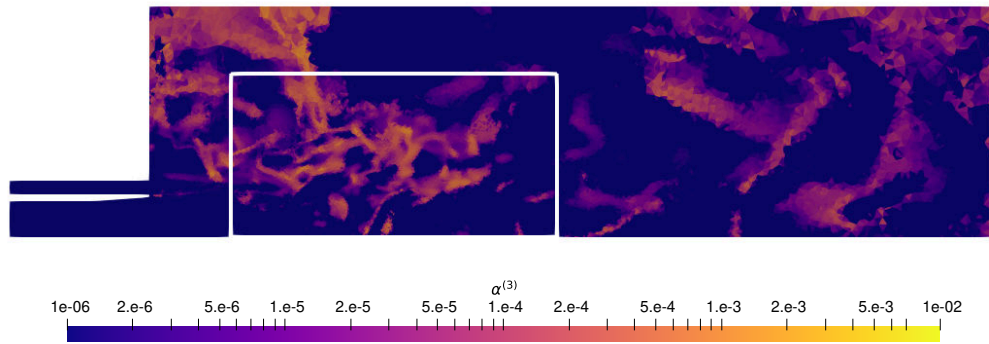
### B.3. Fraction volumique de gouttes par classe



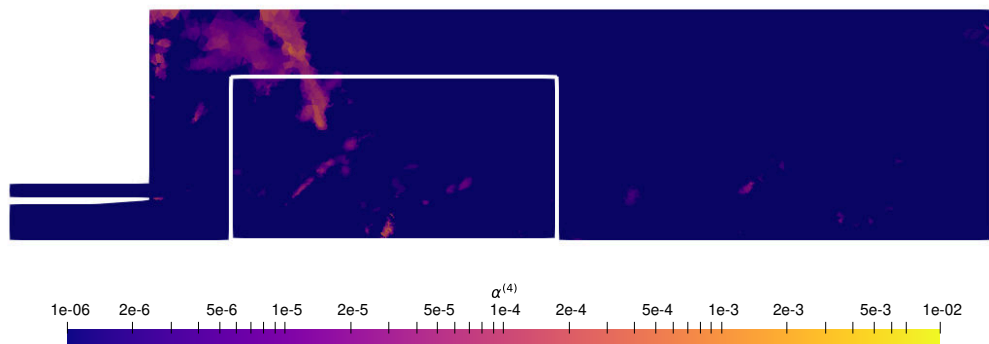
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE B.3. – Champs de fraction volumique de goutte par classe, (a)  $I_S^{(1)}$ , (b)  $I_S^{(2)}$ , (c)  $I_S^{(3)}$ , (d)  $I_S^{(4)}$





# Estimation du volume des structures liquides sur des images d'ombroscopies par apprentissage profond et l'utilisation de simulations haute fidélité

Cette annexe donne l'article de conférence présenté lors de la conférence EUCASS 2023 à Lausanne. Cette étude aborde une nouvelle approche pour estimer avec précision le volume des structures liquides atomisées dans la chambre de combustion des moteurs-fusées à liquide. L'estimation précise du volume est un défi en raison de la nature 2D des images d'ombroscopie. L'approche vise à améliorer la précision de la mesure en tirant parti de l'apprentissage profond et des avancées en matière de simulation, en utilisant des simulations de dynamique des fluides comme vérité de base pour l'entraînement d'un réseau neuronal. Les résultats sont comparés aux algorithmes classiques d'analyse d'images.

# Volume estimation of liquid structures on shadowgraphy images using deep learning and high-fidelity simulations

Florian Granger<sup>1,3</sup>, Magdeleine Airiau<sup>1,3</sup>, Robin Devillers<sup>1</sup>, Laure-Emilie Martin<sup>1</sup>, Luc-Henry Dorey<sup>1</sup>,  
Jean-Christophe Hoarau<sup>1</sup>, Davide Zuzio<sup>2</sup>, Jean-Luc Estivalezes<sup>2</sup>

<sup>1</sup>DMPE, ONERA, Université Paris Saclay, F-91123 - Palaiseau, France

<sup>2</sup>DMPE, ONERA, Université Toulouse, F-31055 - Toulouse, France

<sup>3</sup>CNES - Transport Spatial - Etablissement de Daumesnil, F-75612, Paris Cedex, France

florian.granger@onera.fr · magdeleine.airiau@onera.fr · robin.devillers@onera.fr

## Abstract

This study presents a novel approach to accurately estimate the volume of atomized liquid structures in the combustion chamber of liquid rocket engines. Accurate volume estimation is challenging due to the 2D nature of shadowgraphy images. The approach aims to improve accuracy by leveraging deep learning and simulation advances, using computational fluid dynamics simulations as ground truth for training a neural network. Results are compared to classical image analysis algorithms.

## 1. Introduction

Liquid propellant rocket engines (LREs) are critical for space exploration and satellite deployment, serving as the primary propulsion system for various launch vehicles. Combustion within the chamber of a liquid rocket engine occurs under extreme conditions that demand precise control and optimization. The combustion chamber experiences high pressures, temperatures, and velocities, creating a harsh environment where efficient fuel atomization and mixing are vital to achieve optimal combustion efficiency. One common type of fuel injection system employed in liquid rocket engines is the coaxial injector. It features an inner oxidizer cylinder surrounded by an annular fuel passage, enabling an efficient mixing of the fuel and the oxidizer. Under the extreme conditions prevailing in the combustion chamber, the atomization process occurs through a combination of primary breakup mechanisms, secondary breakup, and subsequent dispersion of the liquid oxidizer. The primary breakup, the initial step in atomization, involves the disintegration of the liquid oxidizer into liquid structures of many sizes and shapes due to the interaction between the high-velocity gas flow and the oxidizer stream. The morphology of atomization regimes for coaxial jets has been classified based on non-dimensional parameters such as the Reynolds number (Re) and Weber number (We) [4]. Among these regimes, the fiber regime, encountered in liquid rocket engines, is the most violent. It is characterized by the formation of long, thin liquid threads or fibers that are stretched and elongated due to the aerodynamic forces exerted by the surrounding gas stream. These fibers exhibit high aspect ratios (length-to-diameter ratios), making them unstable and are prone to further break up into smaller droplets or detached ligaments. While empirical laws [16] exist for average atomized liquid structures, they provide limited information about the local instantaneous distribution or shape. However, accurately quantifying and understanding the distribution of atomized structures within the combustion chamber is crucial, as it directly influences combustion characteristics, including fuel-oxidizer mixing, flame stability, and combustion efficiency. A proper understanding of the atomized structures is essential to optimize fuel injection strategies, ensuring combustion stability, and improving overall engine performance.

Simulations, such as Direct Numerical Simulations (DNS), provide a powerful tool to study the atomization process and obtain detailed information about liquid structures [11]. However, the computational resources required for DNS are substantial, making it a costly option, particularly for parameter studies in an industrial context. On the experimental front, granulometry measurements using laser-based techniques [7] and shadowgraphy imaging [18] have proven to be effective in investigating atomized structures. Laser measurements enable the probing of a small portion of the spray, providing localized information about the size and spatial distribution of droplets. On the other hand, shadowgraphy imaging offers a comprehensive view of the entire spray length, allowing for direct visualization and measurement of the liquid structures within the combustion chamber. By capturing high-resolution images of the atomized structures, shadowgraphy imaging enables detailed analysis of their size, shape, and spatial distribution. These visual data serve as valuable inputs for quantitative analysis and can be coupled with image processing algorithms

## DEEP LEARNING VOLUME ESTIMATION

to extract precise measurements of the liquid structure's sizes. However, the visualized droplets on the image are 2D projections of real 3D liquid structures: equivalent diameters or characteristic lengths estimated in 2D are hard to convert into 3D data such as accurate volume values, even more with the additional uncertainty due to blurred droplets. While stereo depth estimation is an old computer vision task [2], monocular depth estimation and volume reconstruction was performing poorly until recent deep learning advances [9].

In this study, we aim to enhance the volume estimation of liquid structures in monocular shadowgraphy images by leveraging the power of deep learning and high-fidelity simulations. The novel approach proposed combines experimental data from shadowgraphy imaging with projections of liquid structures obtained from DNS. These CFD simulations serve as ground truth data to train and test the neural network. The trained neural network will subsequently read the 2D shadowgraphy images and give back an accurate estimation of the actual liquid structures size. By exploiting the complementary strengths of experimental measurements and numerical simulations, the accuracy and reliability of volume estimation for liquid structures in shadowgraphy images can be improved. The subsequent sections of this article elaborate on the methodology for liquid structure volume estimation using deep learning and high-fidelity simulations. The details of the neural network architecture used in this study is presented and the creation of a learning and test database that incorporates high-fidelity simulations, ranging from baseline liquid/gas interface visualizations to realistic ray-tracing renderings is discussed. Furthermore, the results obtained from the deep learning model are presented and compared with those using classical image analysis algorithms.

## 2. Methodology

Traditionally, the size estimation of liquid structures involves applying a threshold to the pixel intensity and computing the projected diameter of the liquid structure, denoted as  $d_{\text{proj}}$ , by integrating its projected surface  $S_{\text{proj}}$ . This estimation method is based on the assumption that the liquid structures can be approximated as spherical drops:

$$d_{\text{proj}} = \sqrt{\frac{4S_{\text{proj}}}{\pi}}. \quad (1)$$

The projected surface can then be related to the volume of the liquid structure  $V$ , further referred as projected volume, as:

$$\frac{S_{\text{proj}}^{3/2}}{V} = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \approx 1.33. \quad (2)$$

However, the fiber regime which has been extensively observed and described in the literature by [18, 13] is showing a wide range of liquid structure sizes and non-spherical shapes. In support of this, an experimental shadowgraphy image obtained from the water/air coaxial configuration by [8] is shown in Figure 1, illustrating the diverse range of liquid structure sizes and shapes present in the system. The volume of some of them, for example the 3<sup>rd</sup> one cannot be accurately estimated with a sphericity hypothesis.

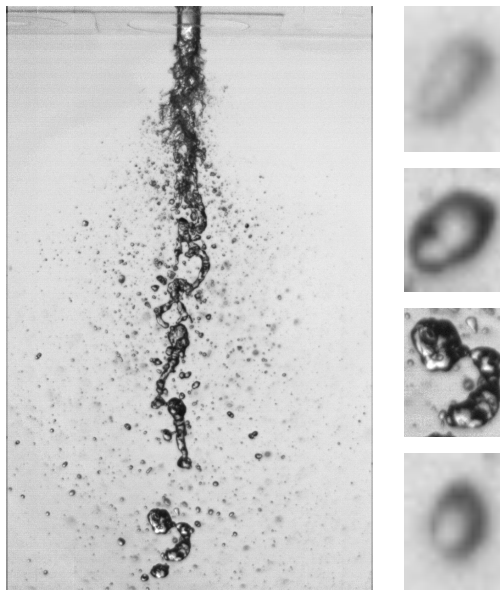


Figure 1: Shadowgraphy from [8] with some isolated liquid structures

The absence of stereo imaging results in the loss of depth information, further complicating the accurate recovery of liquid structure volumes. Deep learning can compensate for the loss of depth information by leveraging prior knowledge acquired during training. However, obtaining a reliable learning and test database with accurate liquid structure volume information poses a significant challenge. In this study, high-fidelity simulation from [11], based on the experimental configuration from [8], has yielded extensive insights into the characteristics of liquid structures atomized from a coaxial injector operating in the fiber regime. This simulation provides a comprehensive dataset of liquid structures with precise volume and location information. By combining these simulation results with rendering software, a valuable dataset of isolated liquid structures volume and the corresponding projection is obtained. This dataset serves as the training and testing data for the deep learning network as illustrated in Figure 2. A detailed explanation of each component will be presented in the subsequent sections.

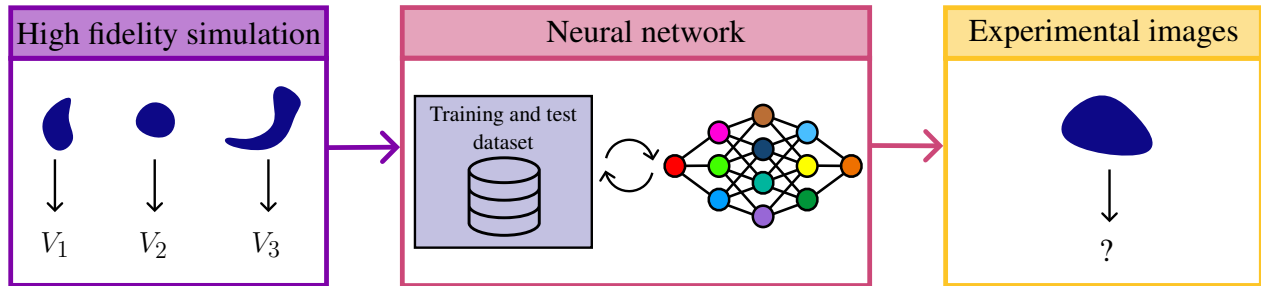


Figure 2: Methodology to combine deep learning and high fidelity simulations for liquid structure volume estimation

### 3. Neural network

#### 3.1 Image Classification with Convolutional Neural Networks

Image classification is a fundamental task in computer vision that categorizes images into predefined classes or categories. The goal is to develop algorithms and models that automatically assign a label or class to an input image based on its visual features. The most effective method in this field uses Convolutional Neural Networks (CNNs), a learning architecture designed for computer vision [5]. Based on the convolution filters, they capture both low-level features (e.g., edges, textures) and high-level semantic information. Training a CNN model for image classification involves providing a large labeled dataset called Ground Truth (GT): the objective is to minimize the difference between the predicted class labels and the GT in the training data.

A neural network set-up involves two phases: the learning phase to build the model and the test phase to assess the model's ability to classify images correctly. The training process involves feeding the input images forward through the network, computing the predicted class probabilities, and comparing them with the true class labels using a loss function. It learns and optimizes its internal parameters (weights and biases) through a process called backpropagation. This iterative process continues for a defined number of iterations, called epochs, or until a convergence criterion is met, ensuring the model learns to classify images accurately. Once the CNN is trained, the test phase is performed to evaluate its performance. A separate dataset, called the test set, is used for this evaluation. This dataset must be distinct from the training dataset to provide an unbiased assessment. During testing, the CNN takes the unseen input images and predicts their class labels. The predicted labels are compared with the true labels to measure the model's performance using various evaluation metrics. The test phase helps assess the model's effectiveness and provides an indication of its performance in real-world scenarios.

#### 3.2 Classification evaluation metric

Accuracy is a widely used metric for evaluating the performance of classification models. It measures the proportion of correctly classified instances from the total number of instances in a dataset by dividing the number of correctly classified instances by the total number of instances :

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{Number of correct predictions}}{\text{Total number of predictions}} \quad (3)$$

While accuracy is a straightforward and intuitive metric, it does have limitations. It assumes that all classes are equally important and that misclassifications have the same cost. It is also recommended to consider a combination of

evaluation metrics to get a comprehensive understanding of the model's performance such as confusion matrices. These matrices allow to directly visualize the performance of an algorithm by comparing instances. Each row represents the real class associated with the object, and each column, the estimated class. For classification with  $n_{\text{class}}$ , let  $i, j \in n_{\text{class}}$ , two classes, the cell  $c_{i,j}$  contains the number of elements of the real class  $i$  which have been estimated as belonging to the class  $j$ . If the classification is perfect, the confusion matrix is, therefore, a diagonal matrix with zeros on the other positions of the matrix. In this work, the accuracy and confusion matrix with metrics based on physical criteria, such as the Probability Density Function (PDFs) will be combined, in order to take into account the physics associated with the phenomena.

### 3.3 Volume classification

In the present study, the aim is to estimate the liquid structure's volume from images. However, volume reconstruction using 2D images is a particularly complex branch of computer vision, requiring large non-trivial neural networks [9]. For this reason, we have chosen to focus on classifying the structures into volume classes rather than trying to find the exact volume of the structure. The spectrum of volumes is discretized into different classes of variable sizes and bins, like a histogram. Every individual liquid structure is identified with an image and a label indicating which volume class it belongs to. The principle is, therefore, to classify the structures in the correct volume class and thus estimate where they lie in the volume histogram. Given the size of the database, which will be detailed in the next section, a large number of classes can be obtained for a refined classification.

To classify structures, a classic AlexNet-inspired classification network [12] with 9 layers, 6 convolution layers, and 3 fully connected layers is used. The loss function is calculated by cross-entropy. The training and test images are drawn randomly from the image database of structures.

## 4. Training database from high fidelity DNS

This section delves into the generation of projections for the training and test database, derived from high-fidelity Direct Numerical Simulations (DNS). With the deep learning architecture in place, the emphasis now shifts toward creating a robust dataset for training and testing purposes.

To isolate liquid structures within the simulation, a baseline image analysis technique is employed as the initial step. This process involves using a tool developed by [1], which facilitates the creation of statistical data for each individual structure present in the simulation. This tool provides valuable information such as the center of mass, the velocity, the interface surface, the volume, and an enclosing box for each structure. Leveraging this information, it becomes possible to isolate a single structure from the surrounding flow, thereby enabling focused analysis and characterization of individual liquid structures. Figure 3 plots an example from [11] of some isolated liquid structures after atomization with their enclosing boxes highlighting their accurate detection.

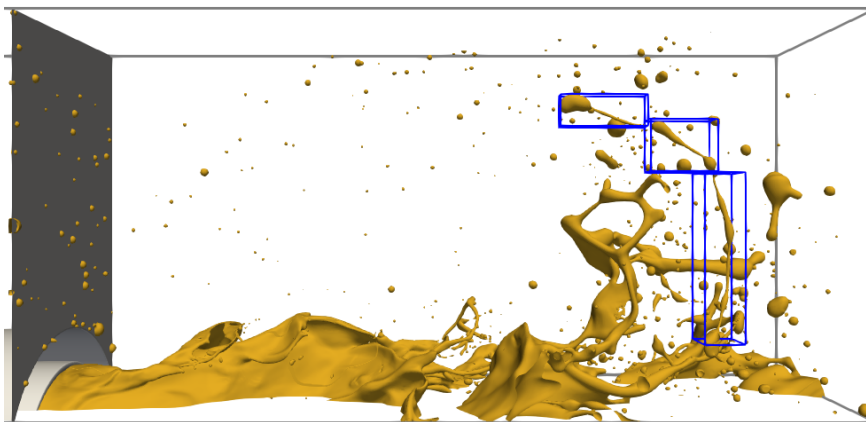


Figure 3: Enclosing boxes on detected liquid structures from ligament atomization, courtesy from [11]

## 4.1 Rendering

Rendering plays a crucial role in enabling a deeper understanding of the physical phenomena occurring in two-phase flow simulations. In this study, ParaView [10], a widely adopted and powerful visualization tool, is used to render and analyze simulation data. It enables visualizing simulation results applying advanced rendering techniques.

### 4.1.1 Baseline rendering

The baseline rendering technique is commonly employed in the visualization of two-phase flow phenomena, as demonstrated in previous works from [14], [3], [6], and [19]. This approach involves coloring the surface of the interface with an arbitrary color, without considering the refraction of light within the liquid structures. It primarily focuses on the reflection of light, resulting in the rendering of volumes with shadows, as illustrated in Figure 3. This rendering technique serves as a foundation for analyzing and understanding the behavior of two-phase flow systems.

In the context of this study, the objective is to generate images that capture the liquid structure with a high enough resolution to discern its intricate details, such as curvatures. To ensure precise visualization, the camera setup is carefully adjusted to center the liquid structure within the image. The angular field of view AFOV, the working distance WD and the number of pixels in both directions are given in Table 1.

WD (m)	AFOV (°)	nb <sub>pix</sub>
$7 \times 10^{-3}$	30	512

Table 1: Baseline rendering parameters

Then the spatial resolution can be deduced from the Field Of View (FOV) of the projection as illustrated in Figure 4 in order to measure quantitative data such as volumes. By dividing the FOV into the desired number of pixels, denoted as nb<sub>pix</sub>, the spatial resolution of the resulting liquid structure projection can be determined as in equation 4.

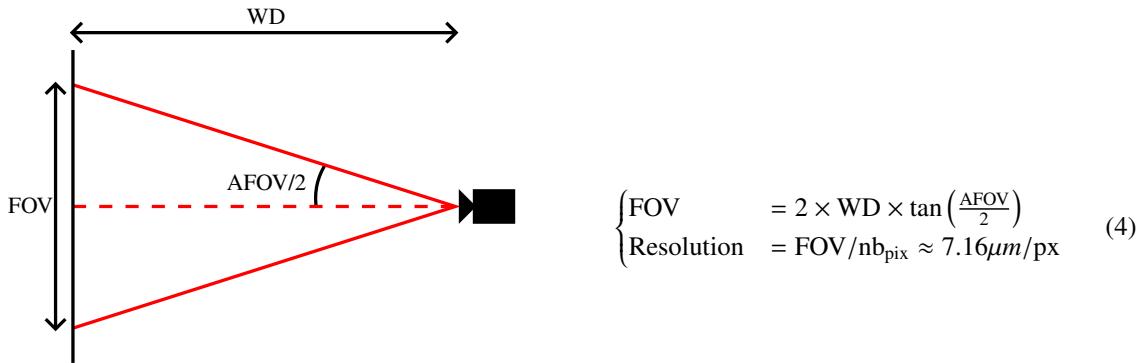


Figure 4: Illustration of camera setup quantities

Figure 5 showcases several liquid structures that have been isolated using the presented method. By considering liquid structures with varying volumes and fixing the WD, it is necessary for the apparent size to be proportional to their respective volumes. This choice enables the neural network to establish a correlation between the apparent size and the volume of the liquid structures.



Figure 5: Baseline rendering for several liquid structures

The baseline rendering technique described above will serve as the initial methodology test for the neural network in the subsequent sections.

### 4.1.2 Realistic rendering

Nevertheless, to accurately estimate the volume of liquid structures in experimental shadowgraphy images, it is crucial to ensure that the rendered simulation projections in the learning and testing databases closely resemble the experimental liquid structures. Previous works by authors such as [18], [17], [15], and [20] have provided shadowgraphy images of inert two-phase flow. Shadowgraphy images from [8] are used as a qualitative reference, as exemplified in Figure 1. The luminosity gradient along the edges of a liquid structure is a distinguishing feature that separates it from the background. It provides important visual information that a realistic rendering of a simulation should be able to capture and reproduce accurately.

Raytracing is a sophisticated rendering technique used in computer graphics to achieve highly realistic images. It simulates the behavior of light by tracing the paths of individual rays as they interact with objects in a scene. By considering optical properties like reflection and refraction, raytracing calculates the color and intensity of each pixel, resulting in visually stunning renderings with realistic lighting, shadows, and materials. Paraview uses the Ospray raytracing library to produce highly realistic rendered images. In this study, specific material parameters are defined for the liquid, creating a glass-like material (as defined by the Ospray library whose values are given in Table 2) that supports refraction and volumetric attenuation. The transparency color varies based on the geometric thickness, and the refraction coefficient is set to the water/air interface value. It is important to note that the attenuation coefficients used in the rendering are not based on physical parameters, but rather chosen arbitrarily to achieve the desired visual effect. Finally, the scene is designed to mimic a backlit experimental shadowgraphy setup, enhancing the realism of the rendered images.

Refraction coefficient	Attenuation distance (m)	Attenuation color
1.33	0.01	[0.01, 0.01, 0.01]

Table 2: Ray tracing, Paraview material parameters for water shadowgraphy rendering

Figure 6 presents the rendered images of the liquid structures that were selected from Figure 5. They exhibit a distinct luminosity gradient along the edges of the liquid structures and a brighter center, similar to what is observed in experimental images shown in Figure 1. These characteristics contribute to the visual realism and accuracy of the rendered images, making them more comparable to the experimental counterparts.

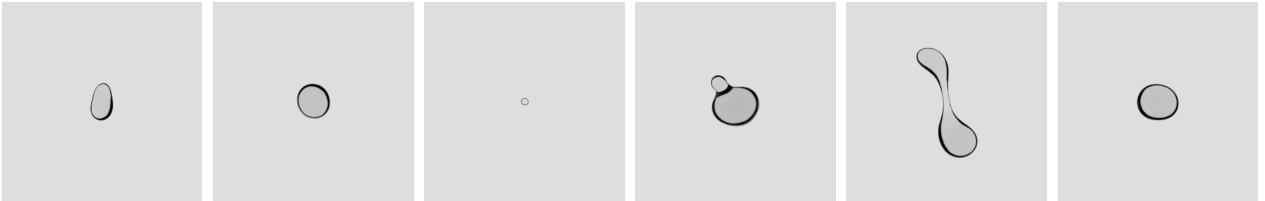


Figure 6: Ray tracing rendering with infinite depth of field

### 4.1.3 Training database specifications

The generation of projections is systematically applied to all liquid structures from the DNS field across multiple snapshots. To increase the number of images available for a given number of liquid structures, the process is performed in three directions: X, Y, and Z. Each resulting image is annotated with the corresponding volume  $V$  and saved in a separate file, serving as ground truth data. Two datasets are generated for the baseline and realistic renderings, one for training and a separate one for testing. The number of images for each dataset is detailed in Table 3.

	Direction	Training	Testing
Baseline	XYZ	425k	6k
Realistic	XYZ	278k	6k

Table 3: Number of simulation projections for the training and testing datasets

It is important to note that the simulation does not equally represent all volume classes, as the distribution of liquid structure volumes follows a log-normal pattern [11]. In order to ensure proper learning across all volume



classes, the dataset is sorted into an equal number of liquid structure projections, denoted as  $n_{\text{proj}}$ , for each class. The  $n_{\text{proj}}$  for each scenario will be presented and discussed in the subsequent sections.

## 5. Limitations with classical image analysis on the projected-volume correlation

Using both baseline and realistic rendering test datasets, a projected volume is estimated through projected surface estimation. Then a correlation map depicting the ratio between the volume estimated from the projected surface  $S_{\text{proj}}^{3/2}$  and the exact volume of the liquid structures  $V$  is presented in Figure 7. It is important to note that all results are scaled by a characteristic size of the flow, namely the thickness of the coaxial injector lip denoted as  $\delta_{\text{lip}}$ , as established in [11]. The maps reveal a significant linear correlation, with a coefficient 1.60. This value observed on a DNS dataset is not far from the 1.33 correlation coefficient for perfect spherical structures determined in section 2. However, it should be noted that the liquid structures exhibit some scatter around the  $S_{\text{proj}}^{3/2}/1.6V$  correlation, especially for smaller diameters on the realistic rendering.

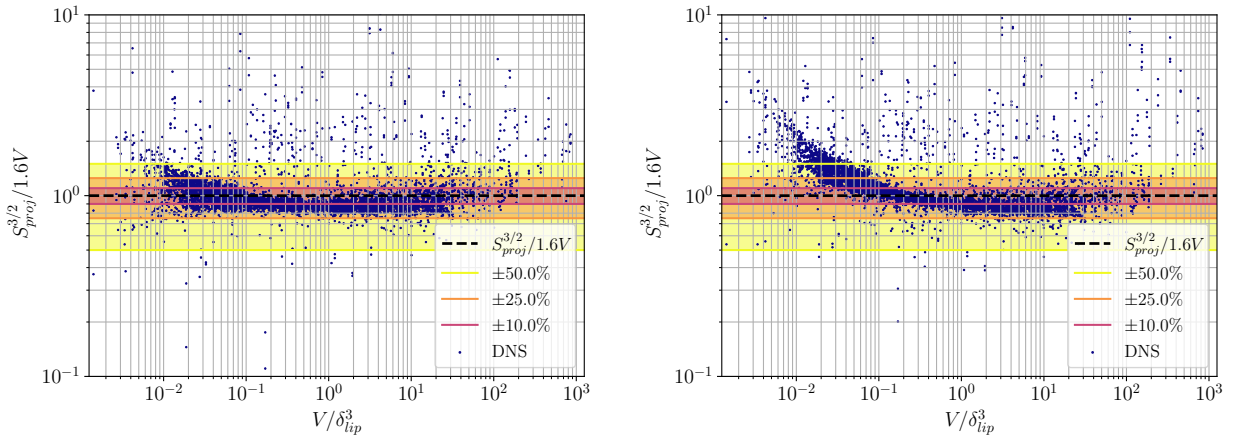


Figure 7: Correlation between the projected and exact volume from baseline (left) and realistic (right) rendering

Figure 8 provides a more detailed analysis of the scattering range observed in Figure 7, represented by the yellow and orange colored stripes. To better understand the correlation patterns, the volume spectrum is divided into three diameter classes:  $d_{\text{proj}}/\delta_{\text{lip}} < 0.5$ ,  $0.5 < d_{\text{proj}}/\delta_{\text{lip}} < 1.0$ , and  $1.0 < d_{\text{proj}}/\delta_{\text{lip}}$ . On the left side of Figure 8, the cumulative probability is plotted, which represents the integration of the liquid structures number with increasing projected volume. The curves show a larger dispersion for the realistic rendering compared to the baseline rendering, indicating a volume-dependent distribution. Notably, the smallest liquid structures where  $d_{\text{proj}}/\delta_{\text{lip}} < 0.5$ , show a very different correlation compared to other volume classes as observed in Figure 7 with values very different from 1 for the  $S_{\text{proj}}^{3/2}/1.6V$  ratio. On the right side of Figure 8, the tolerance according to the 1.6 correlation is plotted. This reveals a wider spread of results for the realistic rendering (only 70% of the overall population is found within a 25% tolerance for the realistic rendering, against 85% for the baseline rendering), particularly for the smallest liquid structures. This suggests that the accuracy of volume estimation through classical image analysis is reduced in these cases. It highlights the importance of alternative approaches such as deep learning techniques and the potential for improvements when dealing with smaller liquid structures in realistic rendering scenarios.

## 6. Neural network results

In this section, we present the results achieved through the methodology outlined in the preceding sections, with a specific emphasis on the learning convergence of the neural network and the precision of the obtained outcomes for both the baseline and realistic rendering scenarios.

### 6.1 Classification and learning parameters

To investigate the learning convergence of the neural network, experiments were conducted by varying the number of volume classes and projections per class during the training process. The objective is to determine the impact of these parameters on the performance of the network in estimating the volume of liquid structures. In this study, a

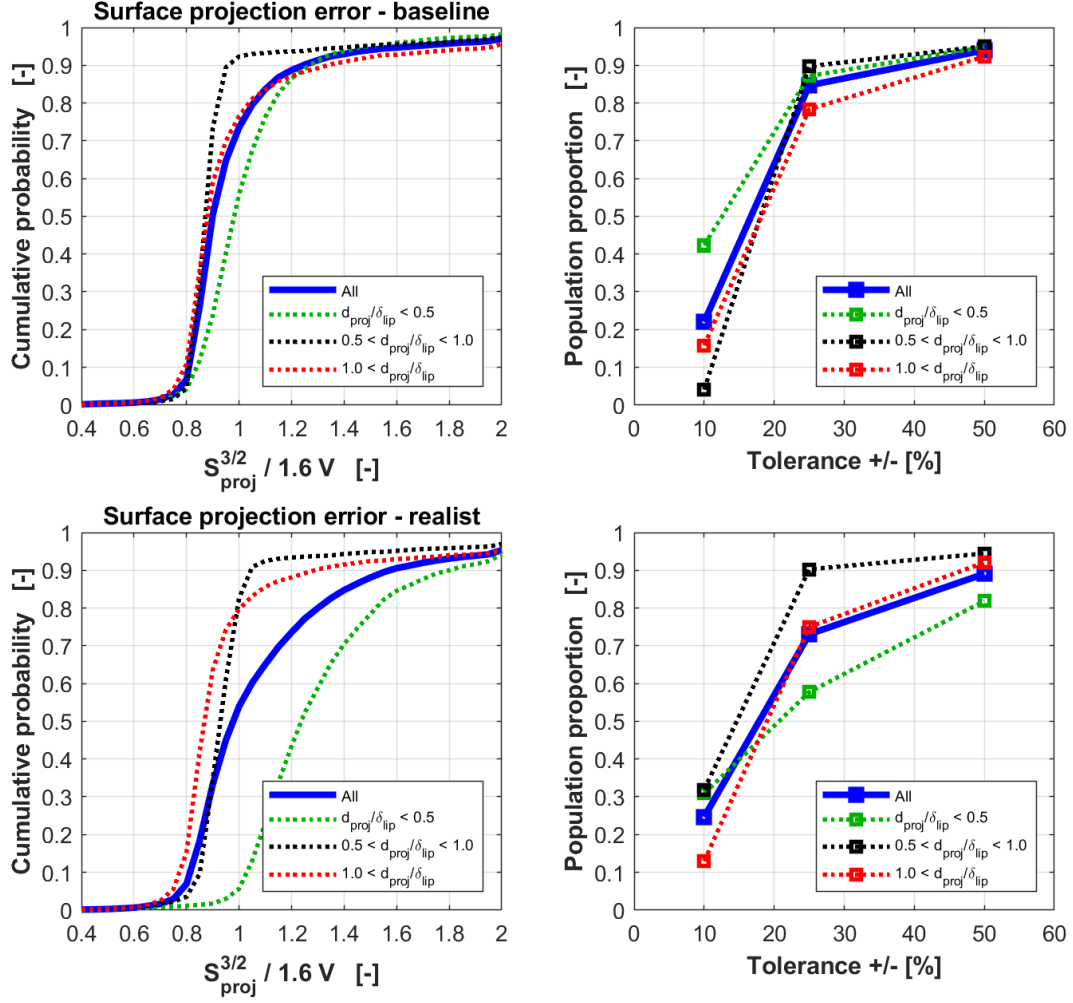


Figure 8: Liquid structures margins error count from baseline (top) and realistic rendering (bottom) for baseline

range from 4 to 10 volume classes is considered with an adjusted number of projections per class from 700 to 1500. Also, an additional classification in 5 classes tagged as specialized (sp) is detailed and will be used in the last section with narrower classes. It is worth noting that the configuration of the liquid structures exhibits a log-normal size distribution, as observed in previous studies [11]. This distribution implies that smaller liquid structures are more abundant compared to larger ones. To ensure a sufficient number of projections available per class and to maintain a balanced representation of the different volume classes, the distribution of classes was adapted according to the PDF from [11] as detailed in Table 4. By systematically analyzing the learning convergence of the neural network under various training configurations, the aim is to identify the optimal settings that would result in accurate and reliable volume estimations. This investigation provides valuable insights into the interplay between the number of volume classes, projections per class, and the learning convergence behavior of the network, allowing the optimization of the training process for this specific application.

	Class range ( $d_{30}/\delta_{lip}$ )									
4 cl.	[0-0.35]	[0.35-0.5]	[0.5-0.75]	[0.75-2.5]						
6 cl.	[0-0.35]	[0.35-0.45]	[0.45-0.6]	[0.6-0.75]	[0.75-1.05]	[1.05-2.5]				
8 cl.	[0-0.35]	[0.35-0.4]	[0.4-0.5]	[0.5-0.6]	[0.6-0.75]	[0.75-1.0]	[1.0-1.25]	[1.25-2.5]		
10 cl.	[0-0.35]	[0.35-0.4]	[0.4-0.5]	[0.5-0.6]	[0.6-0.7]	[0.7-0.85]	[0.85-1.05]	[1.05-1.25]	[1.25-1.5]	[1.5-2.5]
sp 5 cl.	[0-0.1]	[0.1-0.2]	[0.2-0.3]	[0.3-0.4]	[0.4-0.5]					

Table 4: Range of  $d_{30}/\delta_{lip}$  sizes for classification into 4, 5, 6, 8 and 10 classes

### 6.1.1 Training convergence

The convergence of the learning process for the neural network is further examined using the baseline database. First, the number of classes is fixed to 6, with a corresponding range of volume classes as outlined in Table 4. The study focuses on evaluating the network convergence by varying the number of projections per class, ranging from 700 to 1500. Multiple training iterations are conducted for each  $n_{proj}$  value, resulting in varying convergence behavior due to the random selection of projections during the learning process. To provide a comprehensive analysis, both the actual convergence data and a fitted polynomial curve are plotted in Figure 9. The results demonstrate that, regardless of the number of projections per class, the neural network loss converges after approximately 5-6 epochs. However, when examining the convergence after 2 epochs, it is observed that a higher number of projections per class results in faster convergence. Overall, these findings highlight the importance of carefully selecting the number of projections per class to optimize the convergence of the neural network.

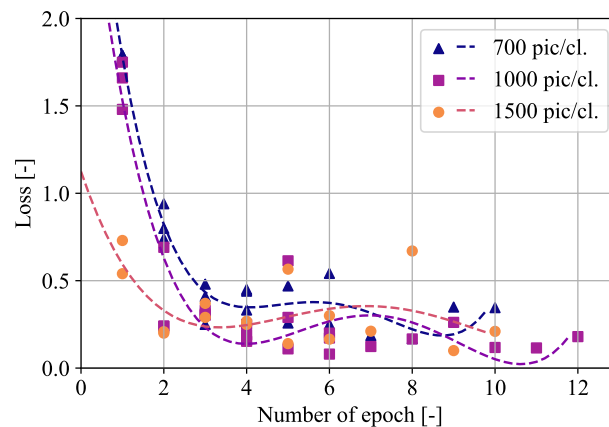


Figure 9: Loss convergence for 6-class training

Subsequently, the number of projections per class, denoted as  $n_{proj}$ , is fixed at 1000, while the number of classes is varied from 4 to 10, following the volume class ranges specified in Table 4. The results plotted in Figure 10 reveal that the networks with 4 and 6 classes exhibit similar loss convergence patterns, reaching a stable state after approximately 4 epochs. This suggests that a moderate number of classes can achieve satisfactory convergence with 1000 projections. However, for the network with 8 and 10 classes, a slightly slower convergence is observed, indicating the need for a higher number of projections to ensure optimal convergence of the training.

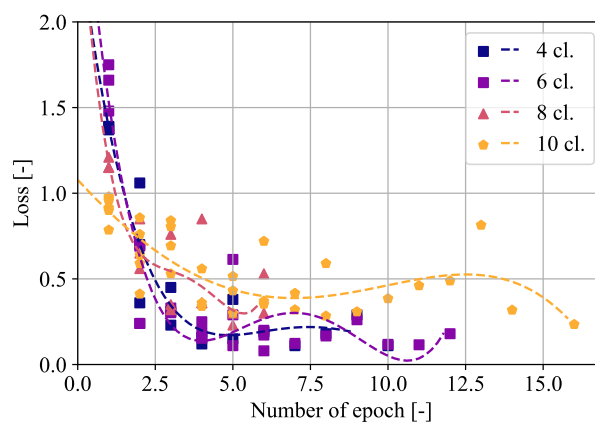


Figure 10: Loss convergence for 1000 projections by class

In order to compare the convergence behavior of the neural network using the baseline and realistic rendering, experiments were conducted with a dataset consisting of 1000 images per class and 10 volume classes. The inclusion of a significant number of classes is necessary to achieve reasonable accuracy in volume prediction. The results of this comparison are presented in Figure 11. It can be observed that the network convergence is slower when using more complex realistic images compared to the baseline rendering. The learning process also seems more dispersed

## DEEP LEARNING VOLUME ESTIMATION

for realistic conditions from one epoch to the following and from one run to another. This can be attributed to the additional visual complexity and intricacies present in the realistic rendering, which may require a more complete training process for the network to learn and accurately estimate the volume of the liquid structures (larger number of projections for each class, training over a larger number of epochs...).

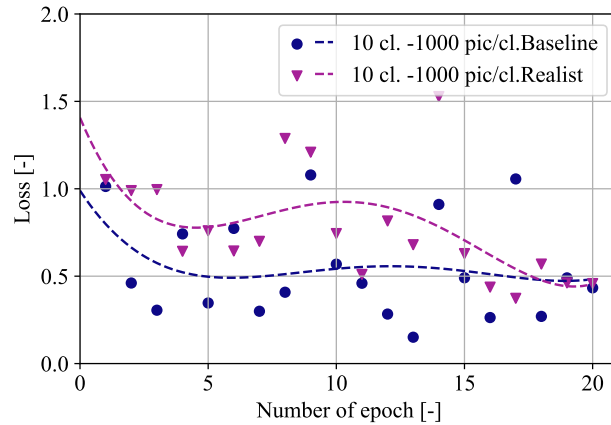


Figure 11: Loss convergence comparison between baseline and realistic dataset

This finding highlights the importance of considering the rendering technique and the level of realism in the training data when designing and training neural networks for volume estimation tasks. While the realistic rendering provides a more visually accurate representation of the liquid structures, it requires a higher number of training epochs to achieve convergence comparable to the baseline rendering.

### 6.1.2 Performance for volume classification

The performance of the trained neural network for estimating the volume of liquid structures is evaluated in this section. To assess the classification accuracy (i.e. classification of projections in the proper volume class), the trained neural network is applied to the test dataset detailed in Table 3. The evolution of accuracy is analyzed by varying the number of training images per class for a range of volume classes, from 4 to 10. Figure 12 illustrates the relationship between accuracy and the number of training images per class. The results demonstrate a consistent trend where increasing the number of training images per class leads to higher accuracy across all volume classes. This observation holds true for all evaluated scenarios, as indicated by the convergence-like behavior of the accuracy curve. It suggests that the neural network benefits from a larger number of training images, allowing it to capture the underlying patterns and improve its estimation precision. In this context, the use of simulated data for training is very helpful since it is able to generate large datasets with much less practical limitations compared to manual annotations.

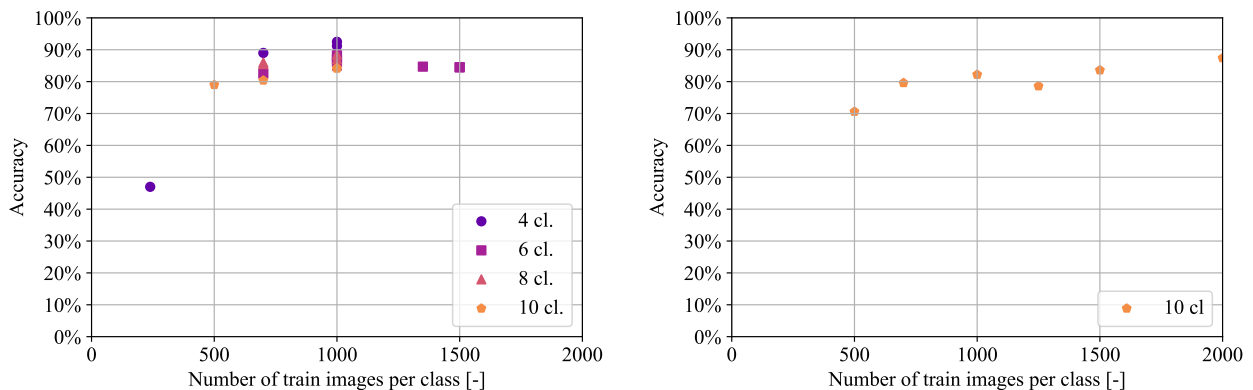


Figure 12: Model accuracy as a function of the number of pictures for each class in the training for the baseline (left) and realistic rendering (right)

The volume error made by the neural network is plotted in Figure 13 to assess the impact of classification errors on physical parameters in the spray. The total volume estimation is obtained by summing the volume estimates for

each projection classified in the testing stage. Typically, there are 50 projections per class, resulting in a total of 200 to 500 projections, depending on the number of classes. The total volume estimated by the neural network classification is compared to the total volume obtained from the ground truth (GT). The maximum error observed is up to 15% for the baseline rendering and 5% for the realistic rendering. These results demonstrate the overall good performance of the network in predicting the overall volume of liquid structures.

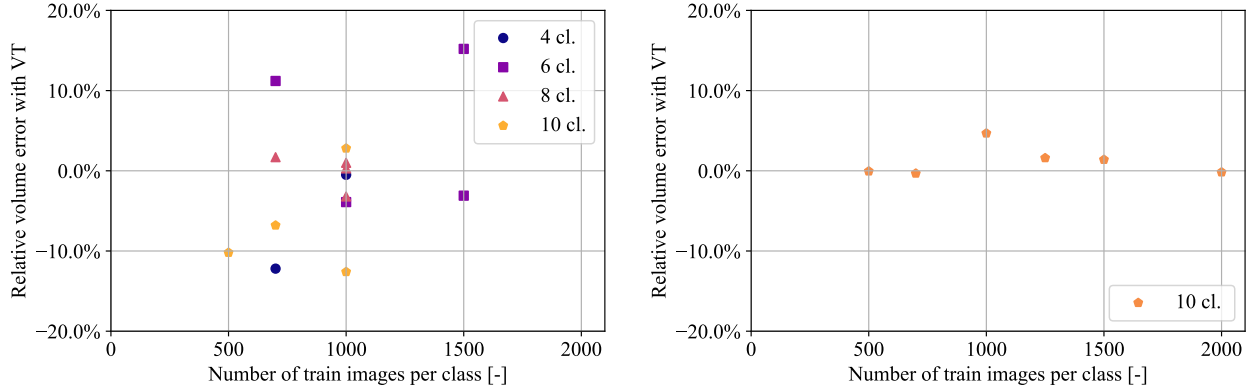


Figure 13: Relative error on the total estimated volume as a function of the number of pictures for each class in training

A more detailed analysis of the neural network accuracy on volume estimation can be achieved by examining the confusion matrices, i.e. comparing the classification for GT and volume estimation via a matrix representation: x-axis for GT volume and y-axis for estimation (correlation or CNN). The dotted line along the diagonal corresponds to an accurate classification (for instance, GT projections from class 4 are estimated in class 4). Figure 14 displays the confusion matrices for the classical image analysis projected volume correlation  $S_{\text{proj}}^{3/2}/1.6$ , and the classifications made by the neural network for both the baseline and realistic rendering scenarios. The results reveal that the projected volumes from baseline and realistic rendering exhibit similar performance for larger volume classes. However, when it comes to smaller liquid structures, the projections from the baseline rendering outperform those from the realistic rendering, as observed in Figure 7: the confusion matrix shows more dispersion around the diagonal for the small volume range (classes 1 to 4) in the case of the realistic rendering. On the other hand, the neural network classifications show reduced scattering compared to the projected volumes, particularly for large volumes. This highlights the effectiveness of the neural network approach in estimating liquid structure volumes.

In order to estimate global statistics on the flow, various PDFs are constructed and displayed in Figure 15, using the ground truth data (GT), the classified ground truth (GT n cl) for the same number of classes used for CNN, the projected volume correlation  $S_{\text{proj}}^{3/2}/1.6$  with its classification, and the trained neural network outputs for both the baseline and realistic rendering scenarios. The results show that the trained neural network enables a precise reconstruction, despite large-range classes, of the PDFs and yields results that are close to those estimated using the projected volume correlation  $S_{\text{proj}}^{3/2}/1.6$ . This demonstrates the capability of the neural network to accurately estimate the volume of liquid structures. However, it is important to note that achieving precise estimations of volume requires a larger number of volume classes which comes with a higher computational cost that increases exponentially. To mitigate this computational burden, one possible approach is to train the neural network for a specific range of sizes, focusing on a narrower size distribution of liquid structures (for instance small structures only). This can help reduce the training time and computational resources required while still achieving accurate volume estimations within the targeted size range.

To address the challenge of estimating liquid structure sizes within a narrow range, a specialized neural network example was developed. This neural network is specifically designed to handle liquid structures with sizes ranging from 0 to 0.5 times the characteristic size  $\delta_{\text{lip}}$ . The size range is discretized into five classes, as defined in Table 4. The training dataset consists of 500 images per class. By focusing on this fine discretization of the size scale, the neural network is able to provide a better discretization of small volume, as demonstrated by the probability density function plotted in Figure 16.

This approach highlights the possibility of training a neural network for precise volume estimation using a relatively low number of training images, provided that the network is specialized for a narrow spectrum of sizes. To cover the entire range of liquid structure sizes, multiple neural networks can be trained, each targeting a specific range of sizes.

## DEEP LEARNING VOLUME ESTIMATION

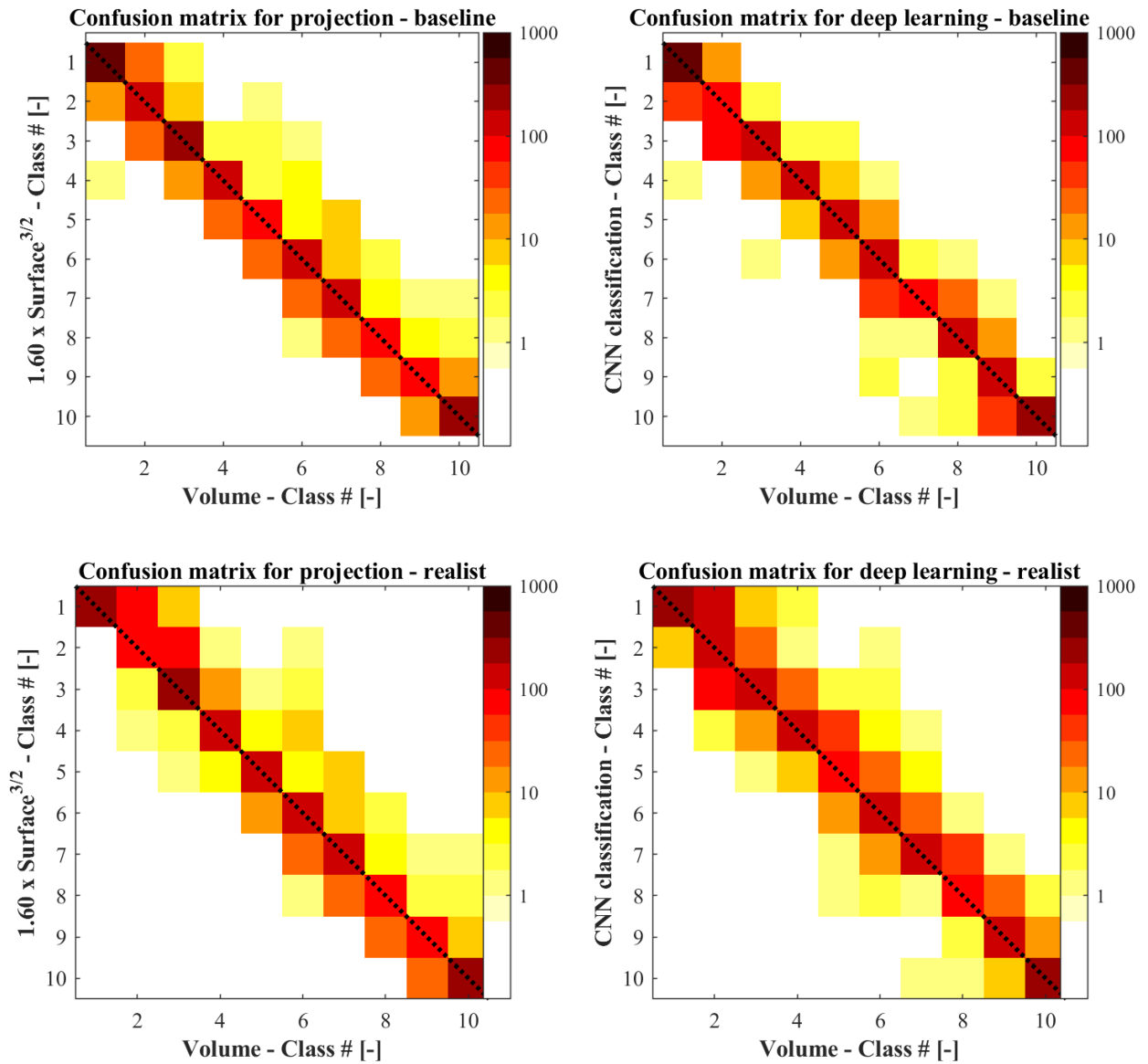


Figure 14: Confusion matrix for the  $S_{proj}^{3/2}$  (left) and neural network (right) estimation on the baseline (top) and realistic rendering (bottom)

## 7. Conclusion

In conclusion, this paper designs a methodology to estimate the volume of a liquid structure in sprays from a single projection using deep learning. A neural network proved to be a viable solution for this task, leveraging its ability to learn from prior information and compensate for the lack of depth information in the images. To generate the training and test dataset, high-fidelity simulation results were employed. The results provided a significant advantage in terms of dataset size and annotation, as they offered a large number of accurately annotated liquid structures, which is usually a bottleneck. The results obtained with the baseline rendering were excellent, demonstrating fast convergence of the neural network with a limited number of training epochs. The training process could be completed within a few hours, highlighting the efficiency of the approach and its applicability in an industrial context. While the results on realistic rendering were also promising, achieving comparable performance to baseline rendering requires a higher number of training epochs and training images per class. This limitation could be addressed by increasing the dataset per volume class with additional images or training specialized neural networks for narrower size bands.

Also, the training configurations for the neural network were carried out on a single Nvidia RTX 2080 Ti GPU and completed within a few hours. This relatively short training time and the use of a single GPU highlight the

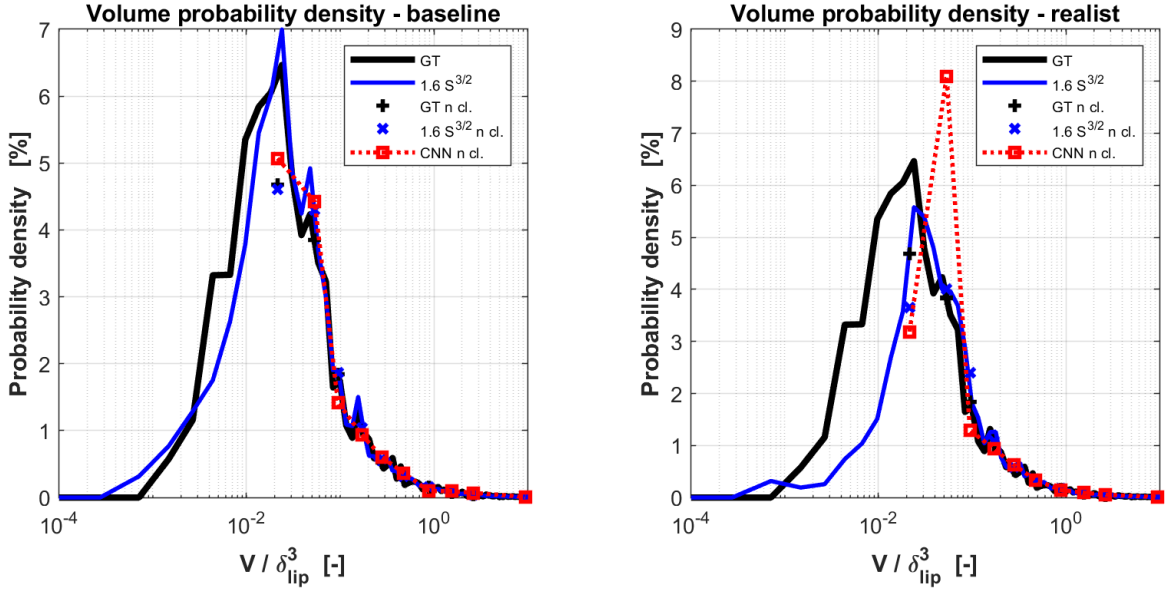


Figure 15: Probability density function on the testing dataset with ground truth, classed ground truth, projected volume correlation  $S_{proj^{3/2}}/1.6V$  and prediction of the neural network for both baseline and realistic rendering

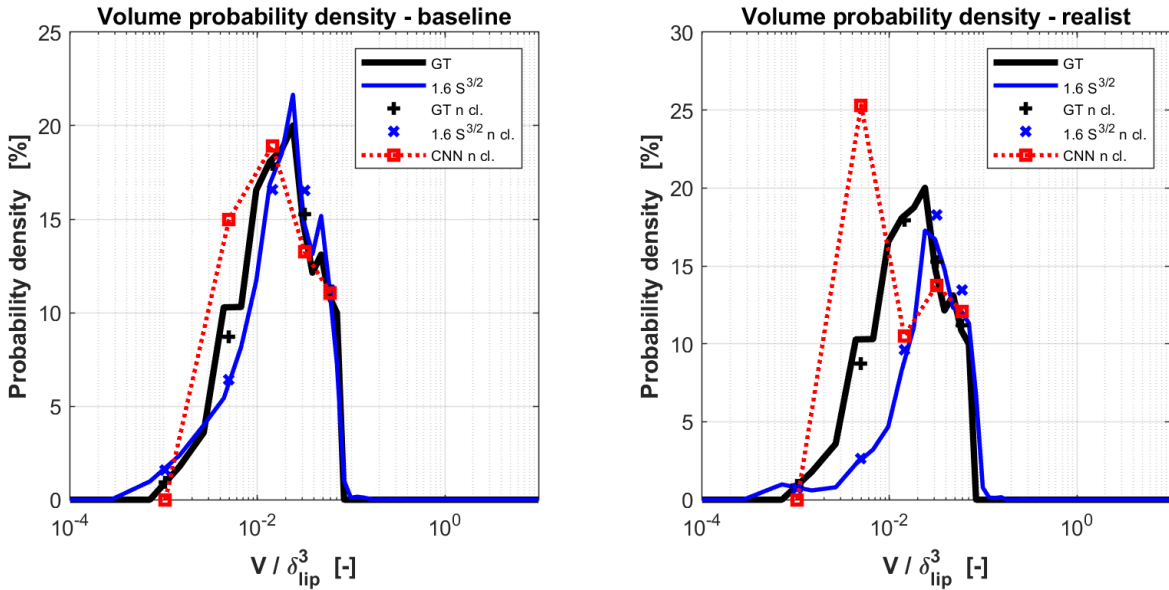


Figure 16: Probability density function of the specialized network for  $0 < d_{30}/\delta_{lip}$

relatively low computational cost associated with the training process. It also suggests that there is potential for further improvements and optimizations in terms of training efficiency and performance. With advancements in hardware and training techniques, it is possible to achieve even faster training times and potentially enhance the accuracy and capabilities of the neural network model.

Looking ahead, future work should consider the inclusion of a limited depth of field during the generation of realistic renderings, which introduces blur in the images and provide more realistic results comparable to experimental conditions. This can be achieved using the same tools and techniques as those presented in this study. More comprehensive metrics such as precision or recall could be used to take account of these dissimilarities. The developed methodology can finally be applied to real experimental images, bringing a new way of quantifying liquid structures of any shape and improving the analysis of experimental data. This would contribute to a better comparison between numerical results and experimental data, which is crucial for model validations and advancing our understanding of the underlying phenomena.



## 8. Acknowledgments

This work was made possible through the support of a PhD grant from CNES (Centre National d'Etudes Spatiales) and ONERA (Office National d'Etudes et de Recherches Aéronautiques). The authors would also like to express their gratitude to the CORIA laboratory for providing the experimental shadowgraphy images from the MARACA test bench.

## References

- [1] M. Averseng. *Contribution à la modélisation de l'atomisation assistée par analyse de simulations haute fidélité*. PhD thesis, Toulouse University, 2022.
- [2] S. T. Barnard and M. A. Fischler. Computational Stereo. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, 14(4):553–572, 1982.
- [3] P. A. Beau, T. Ménard, R. Lebas, A. Berlemont, S. Tanguy, and F. X. Demoulin. Numerical jet atomization. Part II: modeling information and comparison with DNS results. In *7th International Symposium on numerical methods for multiphase flows*, 2006.
- [4] N. Chigier and Z. Farago. Morphological Classification of Disintegration of Round Liquid Jets in a Coaxial Air Stream. *Atomization and Sprays*, 2(2):137–153, 1992.
- [5] Dan C. Cireşan, Ueli Meier, Jonathan Masci, Luca M. Gambardella, and Jürgen Schmidhuber. Flexible, high performance convolutional neural networks for image classification. In *Proceedings of the Twenty-Second International Joint Conference on Artificial Intelligence - Volume Volume Two, IJCAI'11*, page 1237â1242. AAAI Press, 2011.
- [6] B. Duret, J. Reveillon, T. Menard, and F. X. Demoulin. Improving primary atomization modeling through DNS of two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 55:130–137, 2013.
- [7] N. Fdida, L. Vingert, Y. Mauriot, L. H. Dorey, and M. Théron. Comparison of LOX / Methane and LOX / Hydrogen cryogenic spray combustion with simultaneous optical diagnostics. *Eucass 2019*, pages 2–11, 2019.
- [8] A. Ficuciello, J. B. Blaisot, C. Richard, and F. Baillot. Investigation of air-assisted sprays submitted to high frequency transverse acoustic fields: Droplet clustering. *Physics of Fluids*, 29(6):1–17, 2017.
- [9] H. Fu, M. Gong, C. Wang, K. Batmanghelich, D. Tao, Ligm Umr, and Esiee Paris. Deep ordinal regression network for monocular depth estimation. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pages 2002–2011, 2018.
- [10] A. Henderson. *The ParaView guide : a parallel visualization application*. Kitware, Inc, 2007.
- [11] J. C. Hoarau, L. H. Dorey, D. Zuzio, F. Granger, and J. L. Estivalèzes. Direct numerical simulation of a subcritical coaxial injection in fiber regime using sharp interface reconstruction. *International Journal of Multiphase Flow*, (to be submitted).
- [12] Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, and Geoffrey E. Hinton. Imagenet classification with deep convolutional neural networks. Red Hook, NY, USA, 2012. Curran Associates Inc.
- [13] A. Kumar and S. Sahu. Liquid jet breakup unsteadiness in a coaxial air-blast atomizer. *International Journal of Spray and Combustion Dynamics*, 10(3):211–230, 2018.
- [14] C. Le Touze, L. H. Dorey, N. Rutard, and A. Murrone. A compressible two-phase flow framework for Large Eddy Simulations of liquid-propellant rocket engines. *Applied Mathematical Modelling*, 84:265–286, 2020.
- [15] H. Malot and J. B. Blaisot. Droplet size distribution and sphericity measurements of low-density sprays through image analysis. *Particle and Particle Systems Characterization*, 17(4):146–158, 2000.
- [16] P. Marmottant. *Atomisation d'un jet liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, Polytechnique Institute of Grenoble, 2001.
- [17] P. Marmottant and E. Villermaux. Fragmentation of stretched liquid ligaments. *Physics of Fluids*, 16(8):2732–2741, 2004.

- [18] P. Marmottant and E. Villermaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, 498(498):73–111, 2004.
- [19] H. Pitsch, O. Desjardins, G. Balarac, and M. Ihme. Large-eddy simulation of turbulent reacting flows. *Progress in Aerospace Sciences*, 44(6):466–478, 2008.
- [20] K. A. Sallam, C. Aalburg, and G. M. Faeth. Breakup of round nonturbulent liquid jets in gaseous crossflow. *AIAA Journal*, 42(12):2529–2540, 2004.

# Table des figures

1.1.	Soldat Chinois lançant une fusée à poudre . . . . .	2
1.2.	Schéma de fusée de Tsiolkovski . . . . .	2
1.3.	(a) Lancement de la Saturn V emportant l'équipage d'Apollo 11 vers la Lune et (b) Buzz Aldrin mettant en place une expérience de voile solaire près du module lunaire . . . . .	3
1.4.	Moteur Vulcain 2.1 . . . . .	5
1.5.	Diagramme des phases de l'oxygène dans l'espace p-T des points de fonctionnement des moteurs de la gamme Ariane, Rutard [2019] . . . . .	6
1.6.	(a) Injecteur à impact de jet utilisé sur le moteur F1, (b) Schéma de l'injecteur <i>pintle</i> du lander Apollo et (c) Dessin injecteur coaxial swirl de Copenhagen Suborbitals . . . . .	6
1.7.	Fond de chambre d'un des moteurs F1 de la Saturn V d'Apollo 11 après le vol . . . . .	7
2.1.	Maquettes de soufflerie à échelle réduite : (a) Ariane 5 dans la veine d'une soufflerie à L'ONERA Modane, et (b) F1 2021 Alfa Romeo . . . . .	10
2.2.	Profil de vitesse (a) laminaire et (b) turbulent dans un canal . . . . .	11
2.3.	Cascade d'énergie turbulente décrite par Kolmogorov [1941] . . . . .	11
2.4.	Détermination du nombre de Weber d'une structure liquide . . . . .	12
2.5.	Régimes d'atomisation assistée en fonction de $Re_l$ , $We_g$ et $J$ , Hopfinger [1998] et Baillot <i>et al.</i> [2009] . . . . .	13
2.6.	Visualisation des régimes d'atomisation assistée issue de Chigier et Farago [1992] et Baillot <i>et al.</i> [2009] . . . . .	14
2.7.	Illustration de l'atomisation structurelle et texturelle sur un jet coaxial en régime fibre . . . . .	15
2.8.	Profils de couche de mélange (a) d'un fluide de même densité et (b) de deux fluides de masses volumiques différentes, Marmottant [2001] . . . . .	16
2.9.	Développement de l'instabilité interfaciale longitudinale et transverse sur le cœur liquide, Marmottant [2001] . . . . .	17
2.10.	Illustration de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sous l'effet d'une accélération transverse . . . . .	18
2.11.	Illustration de l'accélération et de l'élongation d'un ligament, Marmottant [2001] . . . . .	19
2.12.	Double exposition d'un ligament avant et après sa brisure avec identification des structures liquides atomisées résultantes, Marmottant et Villermaux [2004b] . . . . .	20
2.13.	Mécanismes de fragmentation d'une goutte isolée, Pilch et Erdman [1987] . . . . .	21
3.1.	Cascade d'énergie turbulente de Kolmogorov et échelles caractéristiques . . . . .	28
3.2.	Jet LOx dans une flamme, rencontré dans un moteur fusée du banc Mascotte (Fdida <i>et al.</i> [2019]) avec l'identification des phases séparées, de la zone mixte et de la phase dispersée . . . . .	33
3.3.	Principe de la méthode de suivi d'interface avec représentation des marqueurs lagrangiens . . . . .	34
3.4.	Illustration d'une (a) interface réelle, et de la reconstruction de l'interface par les méthodes (b) SLIC, (c) PLIC, (d) PROST . . . . .	35
3.5.	Calcul flux de VoF $G_{i+\frac{1}{2},j}$ sur la face $i + \frac{1}{2}, j$ d'une cellule contenant une interface . . . . .	36
3.6.	Illustration de la fonction Level Set par plusieurs iso-contours, Zuzio [2011] . . . . .	36
3.7.	Application d'un champ de vitesse rotationnel à la fonction Level-Set : (a) Etat initial (b) Perte de propriété de distance à l'interface (c) Re-distanciation après advection, Zuzio [2011] . . . . .	37
3.8.	Position de calcul des variables pression et vitesse sur un maillage MAC . . . . .	39
3.9.	Calcul de la masse volumique sur un volume de contrôle de vitesse . . . . .	40

3.10. Principe méthode Ghost-Fluid sur la pression pour une interface située entre les cellules $(i, j)$ et $(i + 1, j)$ . . . . .	41
3.11. Représentation d'un jet coaxial dont l'interface est modélisée par une interface diffuse ou reconstruite . . . . .	43
3.12. Distribution en taille des méthodes sectionnelles (a) monodisperse, (b) polydispersée, (c) OSM, (d) TSM linéaire et (e) TSM exponentiel . . . . .	54
3.13. Schématisation du couplage entre le SPS et le DPS . . . . .	61
3.14. Fonction d'efficacité du terme source d'atomisation primaire $\lambda_A$ . . . . .	62
3.15. Propriétés des gouttes transférées dans le SPS : a) Moyennes uniformes et constantes, b) Distribuées uniformes et constantes, c) Moyennes dynamiques, d) Distributions dynamiques, Le Touze [2015] . . . . .	63
3.16. Fonction d'efficacité du terme source de pseudo-coalescence $\lambda_C$ . . . . .	64
4.1. Identification des régimes d'atomisation et des points de fonctionnement envisagés, issu de Hopfinger [1998] et Baillot <i>et al.</i> [2009] . . . . .	69
4.2. Géométrie de l'injecteur de la configuration PF-ONERA . . . . .	71
4.3. Visualisation réaliste de l'interface liquide/gaz issu de la simulation DNS-M1 . . . . .	72
4.4. Inclusion de l'algorithme de détection dans DyJeAT et principe de fonctionnement en externe (AlgoDetect) . . . . .	73
4.5. Exemple de structures liquides détectées et balisées (a) avant et (b) après propagation des tags, indiqué dans chaque cellule . . . . .	74
4.6. Critères de sphéricité $\beta$ et $\gamma$ fonction de la longueur du cylindre $L_{cyl}$ de la structure liquide théorique . . . . .	76
4.7. Classification de structures liquides en fonction des critères $\gamma$ et $\xi$ . . . . .	76
4.8. Évolution temporelle de la longueur de cœur liquide et position estimée de la fin du transitoire . . . . .	77
4.9. Évolution temporelle du nombre de gouttes telles que $\sqrt[3]{L_x L_y L_z} \in [0, 5\Delta_{DNS}]$ . . . . .	78
4.10. Densité de probabilité estimée par noyau gaussien des maillages DNS-M1, DNS-M2 et DNS-3 . . . . .	79
4.11. Densité de probabilité du maillage DNS-M1 et des maillages DNS-M2, DNS-M3 mis à l'échelle . . . . .	80
4.12. Densité de probabilité des maillages DNS-M1, DNS-M2, DNS-M3 filtrées à $2\Delta_{DNS-M3}$ . . . . .	80
4.13. Champ moyen temporel et azimutal de densité d'aire interfaciale . . . . .	81
4.14. Intégrale de la densité d'aire interfaciale selon l'axe $X$ , et intégrales du nombre de ligaments détachés et de gouttes sphériques . . . . .	82
4.15. Intégrale de l'aire interfaciale selon l'axe $X$ pour le cœur liquide, les ligaments détachés et les gouttes sphériques . . . . .	83
5.1. Représentation du domaine de calcul et de sa discrétisation spatiale . . . . .	87
5.2. Visualisation instantanée de l'interface liquide/gaz LES pour différentes fractions volumique de liquide $\alpha_l$ . . . . .	90
5.3. (a) Profils de vitesse liquide et (b) gaz DNS et LES en sortie d'injecteur . . . . .	91
5.4. Longueurs de cœur liquide LES pour $\alpha_l = 0.9, 0.99, 1.0$ et DNS-M1 avec les positions des changements de maillage LES-T1 vers LES-T2 et LES-T2 vers LES-M96 . . . . .	92
5.5. Illustration de la considération reconstruite à l'iso-surface $\alpha_l = 0.5$ d'une structure liquide diffuse 1D . . . . .	93
5.6. Domaine de calcul du cas de convection de goutte . . . . .	93
5.7. Interpolation du champ de fraction volumique de liquide $\alpha_l$ sur un maillage cartésien grâce à MAIA . . . . .	94
5.8. Iso-contour $\alpha_l = 0.5$ sur une goutte sphérique . . . . .	94
5.9. Noyau filtrage gaussien 2D approximé sur 9 mailles avec $\sigma_{gauss} = 0.8$ . . . . .	94
5.10. Goutte et iso-surface $\alpha_l = 0.5$ avant et après filtrage . . . . .	95

5.11. Seuillage de la goutte filtrée . . . . .	95
5.12. Comparaison des PDFs DNS et LES avec interprétation reconstruite, (a) sans rescaling et (b) avec rescaling et agrandie sur la PDF LES-M96 . . . . .	96
5.13. Champ instantané brut de fraction liquide volume en échelle logarithmique . . . . .	97
5.14. Champ instantané de fraction liquide volume seuillé à $\alpha_l = 0.5$ . . . . .	97
5.15. (a) Structures liquides brutes et (b) après seuillage . . . . .	98
5.16. Goutte brute avec iso-contours $\alpha_{\text{seuil}} = 10^{-5}, 10^{-2}, 0.5$ . . . . .	98
5.17. Erreur estimation volume et surface sans filtrage . . . . .	99
5.18. Erreur faite sur l'estimation du volume et de la surface avec filtrage du champ de fraction volumique de liquide . . . . .	100
5.19. Champs instantanés de fraction volumique de liquide avec iso-contours (a) $10^{-1}$ , (b) $10^{-2}$ et (c) $10^{-3}$ . . . . .	101
5.20. Comparaison des PDFs des DNS et de la LES avec une interprétation diffuse, (a) sans rescaling et (b) avec rescaling, agrandie sur la PDF LES-M96 . . . . .	101
5.21. Filtrage des PDFs LES et DNS à (a) $2\Delta_{\text{LES-M96}}$ et (b) $4\Delta_{\text{LES-M96}}$ . . . . .	102
5.22. Gouttes 1D diffusées . . . . .	102
5.23. Carte $\max(\alpha_l)$ en fonction de la taille des structures liquides $d_V$ . . . . .	103
5.24. Possibilités de diffusion d'une structure liquide . . . . .	104
5.25. Carte de la taille de structures liquides en fonction leur nombre de cellules . . . . .	105
5.26. PDFs des DNS de référence comparées à celle de la LES à interface diffuse avec (a) interprétation reconstruite et (b) interprétation diffuse . . . . .	105
6.1. Configurations possibles menant à une même densité d'aire interfaciale, (a) d'une grande structure liquide soumise à déformation et (b) d'un écoulement dilué et polydispersé . . . . .	108
6.2. Interface liquide/gaz d'une simulation DyJeAT avec $\Delta_{\text{DNS-1}}$ (rouge) et $\Delta_{\text{DNS-2}} = 16\Delta_{\text{DNS-1}}$ (noir) sur deux instants proches (a) et (b), Averseng [2022] . . . . .	109
6.3. Mesure de $\Sigma_{\text{min}}$ sur une cellule sphérique . . . . .	113
6.4. Taille de cellule moyenne dans la zone d'atomisation . . . . .	115
6.5. Champ instantané de fraction volumique de cellule sur le maillage LES-M9 . . . . .	115
6.6. Vitesse d'injection du liquide (a) et du gaz (b) à la position $x = 0$ . . . . .	116
6.7. Fonction indicatrice de résolution $\Psi$ . . . . .	120
6.8. Décroissance de la vitesse du gaz de la simulation DNS-M1 avec les fonctions de décroissance en $1/x$ et $1/\sqrt{x}$ . . . . .	122
6.9. Champs intantanés de la LES-M9 avec le modèle de DAI. (a) Fraction volumique de liquide $\alpha_l$ , (b) DAI résolue $\Sigma_{\text{res}}$ , (c) DAI de sous-maille $\Sigma'$ et (d) DAI totale $\Sigma = \Sigma_{\text{res}} + \Sigma'$ . . . . .	124
6.10. Comparaison de la longueur de cœur liquide entre les maillages LES-M9 et DNS-M1 . . . . .	125
6.11. Évolution de l'épaisseur de couche de mélange pour la LES-M9 et DNS-M1 . . . . .	125
6.12. Profils de densité d'aire interfaciale aux positions $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4$ pour la DNS-M1 de référence ainsi que pour la LES-M9 avec le modèle de sous maille à $We_{\text{cr}} = 3.5$ . . . . .	127
6.13. Profils de DAI des simulations LES-M5, LES-M9, LES-M20, DNS aux positions $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4$ avec $We_{\text{cr}} = 3.5$ . . . . .	128
6.14. Profils de DAI aux positions $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4$ pour la DNS la simulation LES-M9 avec $We_{\text{cr}} = 1, 3, 4, 5, 7$ . . . . .	129
6.15. Fonction indicatrice d'atomisation $\lambda_{\text{atom}}$ pour les paramètres $a_\lambda, b_\lambda$ définis dans le Tableau 6.3 . . . . .	130
6.16. Profils de DAI aux positions $X_{\text{DNS}} = 1, 2, 3, 4$ avec le maillage LES-M9 pour les fonctions $\lambda_{\text{atom}}$ définis dans le Tableau 6.3 avec $We_{\text{cr}} = 3.5$ . . . . .	131
7.1. Représentation du champ instantané de fraction volumique de liquide du SPS . . . . .	137
7.2. Représentation du champ instantané de fraction volumique de liquide du SPS et de la fraction volumique de gouttes du DPS par volume rendering . . . . .	137

7.3.	Intégrale du débit d'atomisation dans le domaine pour les sections $I_S^{(1)}$ à $I_S^{(4)}$ . . .	138
7.4.	Intégrale du débit de pseudo-coalescence dans le domaine pour les sections $I_S^{(1)}$ à $I_S^{(4)}$ . . . . .	139
7.5.	Intégrale du terme de couplage massique $P_M$ pour les sections $I_S^{(1)}$ à $I_S^{(4)}$ . . . . .	140
7.6.	Champ de fraction volumique de liquide $\alpha_l$ instantané de la simulation avec couplage CHARME-SPIREE par la densité d'aire interfaciale. La zone d'atomisation est indiquée par un rectangle blanc. . . . .	140
7.7.	Évolution temporelle du débit d'atomisation par section dans la zone d'atomisation	141
7.8.	Évolution temporelle du débit de coalescence par section dans la zone d'atomisation	141
7.9.	Évolution temporelle du terme de couplage $P_M$ par section dans la zone d'atomisation	142
7.10.	Évolution temporelle de la taille moyenne des gouttes atomisées dans la zone d'atomisation . . . . .	142
7.11.	(a) PDF globale moyenne de taille de goutte de la DNS-M1 et (b) PDF instantanée de taille de gouttes atomisées dans la zone d'atomisation . . . . .	144
B.1.	Champs instantanés de densité d'aire interfaciale (a) résolue $\Sigma_{res}$ , (b) transporté de sous-maille $\Sigma'$ et (c) totale $\Sigma$ . . . . .	175
B.2.	Champs instantanés de débits d'atomisation par classe, (a) $I_S^{(1)}$ , (b) $I_S^{(2)}$ , (c) $I_S^{(3)}$ , (d) $I_S^{(4)}$ . . . . .	176
B.3.	Champs de fraction volumique de goutte par classe, (a) $I_S^{(1)}$ , (b) $I_S^{(2)}$ , (c) $I_S^{(3)}$ , (d) $I_S^{(4)}$ . . . . .	177

# Liste des tableaux

3.1.	Valeurs pratiques des coefficients du modèle $k - \varepsilon$ . . . . .	31
3.2.	Valeurs pratiques des coefficients du modèle $k - \omega$ . . . . .	31
3.3.	Hiérarchie de modèles diphasiques obtenus par relaxation du modèle général, Le Touze [2015] . . . . .	44
3.4.	Avantages et inconvénients des méthodes phase dispersée lagrangiennes et eulériennes, Le Touze [2015] . . . . .	59
3.5.	Avantages et inconvénients des méthodes numériques pour décrire un écoulement diphasique atomisant, complété de Le Touze [2015] . . . . .	60
3.6.	Comparaison des méthodes et applications des codes DyJeAT et CEDRE . . . . .	66
4.1.	Nombres caractéristiques d’injection coaxiale de la littérature et estimation du nombre de mailles nécessaires pour leur réalisation pratique en DNS . . . . .	70
4.2.	Tailles de maille DNS . . . . .	71
4.3.	Critères de définition d’un ligament détaché . . . . .	76
4.4.	Nombre moyen de structures liquides dans le domaine de calcul . . . . .	79
4.5.	Nombre moyen de structures liquides dans le domaine de calcul filtrés jusqu’à $d_{30} = \Delta_{\text{DNS-M3}}$ . . . . .	81
5.1.	Paramètres numériques et modèles de la simulation LES-M96 . . . . .	88
5.2.	Exemple de propriétés thermodynamiques dans un gaz parfait et un liquide compressible avec estimation de leur vitesse du son . . . . .	89
5.3.	Écart à la référence pour les mesures de volume et de surface sur une goutte isolée . . . . .	95
5.4.	Diffusion spatiale, minimale, moyenne et maximale pour les 2 échelles de coupures précédemment identifiées . . . . .	105
6.1.	Maillages LES pour la validation du modèle de densité d’aire interfaciale . . . . .	114
6.2.	Coefficients des lois de décroissance $K$ et $u_\infty$ pour des écoulements libres issus d’injecteurs ronds, plans et coaxiaux . . . . .	121
6.3.	Paramètres de la fonction indicatrice d’atomisation $\lambda_{\text{atom}}$ étudiés . . . . .	130
7.1.	Exemple d’évaluation de la section d’atomisation pour la méthode sectionnelle . . . . .	135
7.2.	Paramètres numériques et modèles du solveur DPS . . . . .	136
7.3.	Comparatif coût de calcul spray DNS et LES . . . . .	144





# Nomenclature

## Grandeurs géométriques et physiques

$C_{ij}$	Tenseur Croisé 29
$C$	Constante/Coefficient 30
$D$	Diamètre injecteur 23
$\Delta V$	Différentiel de vitesse 2
$J$	Flux 43
$K$	Noyau 78
$\Phi$	Variable Level-Set 36
$L_{ij}$	Tenseur de Léonard 29
$M$	Masse molaire 47
$\Psi$	Fonction de convergence en maillage 117
$R$	Rayon $r$ adimensionné par $D_l$ 126
$R_{ij}$	Tenseur de Reynolds 29
$\Sigma$	Densité d'aire interfaciale 80
$S_{ij}$	Tenseur des efforts résolus 31
$S$	Surface 57
$T$	Température 44
$V$	Volume 19
$X$	Direction $x$ adimensionnée par $D_l$ 81
$Y$	Fraction massique 45
$\alpha$	Fraction volumique 31
$\theta$	Angle du spray 24
$c$	Vitesse du son 42
$\delta$	Épaisseur caractéristique 15
$\rho$	Masse volumique 10
$d$	Diamètre de goutte ou de ligament 19
$e$	Énergie 26
$s$	Entropie 47
$\varepsilon$	Taux de dissipation 27
ep	Épaisseur 102
$J$	Flux 26
$f$	Fréquence caractéristique 17
$h$	Épaisseur/largeur 17
$I$	Matrice identité 26
$\kappa$	Courbure 27
$\delta_{ij}$	Sigle de Kronecker 30
$k$	Énergie cinétique 30
$L$	Longueur caractéristique 10
$\lambda$	Longueur d'onde 16
$\eta$	Échelle de Kolmogorov 27
$l$	Longueur caractéristique des petites échelles 26
$m$	Masse 2
$\dot{m}$	Débit massique 12
$\mu$	Viscosité dynamique 10
$N$	Nombre 27
$n$	Densité numérique 53
$\nu$	Viscosité cinématique 26
$\omega$	Production des espèces par réaction chimique 45

$p_b$	Distribution en taille de gouttes	19
$p$	Pression	26
$r$	Rayon	51
$\mathcal{T}$	Temps caractéristique	20
$\Delta$	Taille de maille	32
$\tau$	Tenseur des contraintes visqueuses	26
$\sigma$	Tension de surface	11
$t$	Échelle temporelle	19
$U$	Vitesse caractéristique	10
$u$	Vitesse locale	2
$n$	Vecteur unitaire normal à l'interface	38
$t$	Vecteur unitaire tangent à l'interface	38
$v$	Vitesse turbulente	26
$x$	Coordonnée sur l'axe $\vec{x}$	15
$y$	Coordonnée sur l'axe $\vec{y}$	15
$z$	Coordonnée sur l'axe $\vec{z}$	28

### Indices et exposants

Brw	Brown et Roshko [1974]	16
Er	Eroglu <i>et al.</i> [1991]	23
Lash	Lasheras <i>et al.</i> [1998]	23
Ler	Leroux <i>et al.</i> [2007]	23
Pap	Papamoschou et Roshko [1988]	16
Ray	Rayleigh	24
Vill	Villermaux [1998]	24
Yule	Yule [1972]	16
abs	Absolue	42
ac	Acquisition	75
*	Adimensionnel	20
atom	Atomisation	63
capil	Capillarité	42
cell	Cellule	73
cg	Centre de gravité	74
cis	Cisaillement	117
cl	Classe	53
cœur	Cœur liquide	24
coll/coal	Phénomènes de collision et de coalescence	112
conv	Convection	17
créa	Création d'interface	113
cr	Critique	18
cyl	Cylindre	75
dens	Phases denses	111
diff	Diffusion	104
disp	Phase dispersée	111
drag	Trainée	51
etir	Étirement	19
eval	Évalué(e)	102
evap	Évaporation	111
filt	Filtré(e)	79
frag	Fragmentation	20
gauss	Gauss, Gaussien(ne)	52
$g$	Phase gaz	10

ge	Grandes échelles 26
grav	Gravité 42
$\infty$	À l'infinie 32
inf	Inférieur(e) 134
init	Initialisation 21
inj	Injecteur/Injection 71
instab	Instabilités interfaciales 111
inst	Instantané 23
interf	Interface 43
lig	Ligament 18
lim	Limite 73
lip	Épaisseur lèvres injecteur coaxial 68
$l$	Phase liquide 10
liss	Lissage 78
max	Maximale 15
mel	Mélange 48
min	Minimale 17
moy	Moyen(ne) 134
//	Longitudinale 16
p	Particule 51
$\perp$	Transverse 16
pe	Petites échelles 27
pla	Plan 121
+	Proche parois 30
'	Sous-maille 112
rec	Reconstruit(e) 121
res	Résolu(e) 116
ret	Retournement 26
rnd	Rond 121
rup	Rupture 111
seuil	Seuil de détection 97
sup	Supérieur(e) 134
th	Théorique 102
tot	Total(e) 22
turb	Turbulent 26
visc	Viscosité 42
vort	Vorticité 15
0	Initial/Référence 19

### Nombres adimensionnels

$\mathcal{J}$	Rapport flux de quantité de mouvement 12
Kn	Nombre de Knudsen 50
Oh	Nombre d'Ohnesorge 12
$\mathcal{R}$	Rapport (masse, quantité de mouvement, ...) 12
Sc	Nombre de Schmidt 57
Sh	Nombre de Sherwood 57
St	Nombre de Stokes 52
Re	Nombre de Reynolds 10
We	Nombre de Weber 11

### Acronymes et sigles

ALE	Arbitraire Eulérienne-Lagrangienne 111
-----	--

---

ARCHER	Academic Research Code for Hydrodynamic Equation Resolution	112
CCL	Connected Component Labeling	72
CCRT	Centre de Calcul Recherche et Technologie	71
CORIA	COmplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie	112
DAI	Densité d’Aire Interfaciale	108
DI	Diffuse Interface	96
ELSA	Euler-Lagrange pour les Sprays et l’Atomisation	110
EUCASS	European Conference for Aero-Space Sciences	145
ICL	Informed Component Labeling	72
ICMF	International Conference on Multiphase Flow	85
IJMF	International Journal of Multiphase Flow	108
MPI	Message Passing Interface	v
NDF	Number Density Function	49
OSM	One Size Moment	53
PGG	Projet Gou-Gouttes	v
RI	Reconstructed Interface	96
THI	Turbulence Homogène Isotrope	112
TSM	Two Size Moment	53
CEDRE	Calcul des Écoulements Diphasiques Réactifs pour l’Énergétique	v
CFL	Courant–Friedrichs–Lewy	42
CLSVOF	Coupled Level Set and Volume Of Fluid	37
CMOM	Conservative MOMentum	39
CNES	Centre National d’Études Spatiales	vii
CPU	Central Processing Unit	v
CSS	Continuum Surface Stress	46
DNS	Direct Numerical Simulation	vii
DPS	Dispersed Phase Solver	50
DyJeAT	Dynamics of Jet ATomization	xiii
ESA	European Space Agency	4
EVA	Extravehicular activity	3
HLLC	Harten, Lax and van Leer with Contact	88
ISS	International Space Station	3
LES	Large Eddy Simulation	vii
MAC	Marker And Cell	38
MUSCL	Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws	49
NASA	National Aeronautics and Space Administration	3
ONERA	Office National d’Études et de Recherches Aérospatiales	i
PDF	Probability Density Function	77
PLIC	Piecewise Linear Interface Calculation	35
Prometheus	Precursor Reusable Oxygen METHane cost Effective Engine	4
PROST	Parabolic Reconstruction Of Surface Tension	35
QDM	Quantité de mouvement	44
RANS	Reynolds Averaged Navier–Stokes	25
SLIC	Simple Line Interface Calculation	35
SPH	Smooth Particle Hydrodynamics	33
SPS	Separated Phases Solver	58
VoF	Volume of Fluid	34
WENO	Weighted Essentially Non-Oscillatory	41

# Bibliographie

ABRAMZON, B. et SIRIGNANO, W., 1989

Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 32 Numéro 9 pages 1605–1618. 57

AVERSENG, M., 2022

*Contribution à la modélisation de l'atomisation assistée par analyse de simulations haute fidélité*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse. 72, 73, 83, 109, 130, 197

AVERSENG, M., ZUZIO, D. et BOUTSIKAKIS, A., 2019

DNS simulation and analysis of periodic planar liquid sheet assisted atomization. *International Conference on Multiphase Flow*. 38

AWBI, H. B., 2003

*Ventilation of Buildings*. Routledge. 121

BAER, M. R. et NUNZIATO, J. W., 1986

A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 12 Numéro 6 pages 861–889. 43

BAILLOT, F., BLAISOT, J. B., BOISDRON, G. et DUMOUCHEL, C., 2009

Behaviour of an air-assisted jet submitted to a transverse high-frequency acoustic field. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 640 pages 305–342. 13, 14, 68, 69, 195, 196

BARONE, M. F., OBERKAMPF, W. L. et BLOTTNER, F. G., 2006

Validation case study : Prediction of compressible turbulent mixing layer growth rate. *AIAA Journal*, Volume 44 Numéro 7 pages 1488–1497. 125

BEAU, P. A., MÉNARD, T., LEBAS, R., BERLEMONT, A., TANGUY, S. et DEMOULIN, F. X., 2006

Numerical jet atomization. Part II : modeling information and comparison with DNS results. Issu de : *International Symposium on numerical methods for multiphase flows*. 112

BLANCHARD, G., 2015

*Modélisation et simulation multi-échelles de l'atomisation d'une nappe liquide cisillée*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse. 49, 120

BOUSSINESQ, J., 1877

*La théorie des eaux courantes*. Impr. nationale. 30

BRODKEY, R. S. et TALBOT, L., 1969

*The Phenomena of Fluid Motions*, volume 22. Addison-Wesley. 20

BROWN, G. L., 1974

The Entrainment and Large Structure in Turbulent Mixing Layers. volume 1, pages 352–359. 16

BROWN, G. L. et ROSHKO, A., 1974

On density effects and large structure in turbulent mixing layers. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 64 Numéro 4 pages 775–816. 16, 202

CANDEL, S. M. et POINSOT, T., 1989

Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area. *Combustion Science and Technology*, pages 37–41. 110

- CAO, G., KANDZIA, C., MÜLLER, D., HEIKKINEN, J., KOSONEN, R. et RUPONEN, M., 2013  
Experimental study of the effect of turbulence intensities on the maximum velocity decay of an attached plane jet. *Energy and Buildings*, Volume 65 pages 127–136. 121
- CHESNEL, J., 2011  
*Simulation aux Grandes Échelles de l'Atomisation, Application à l'Injection Automobile*. Thèse de doctorat, Université de Rouen. 112, 113, 116
- CHESNEL, J., REVEILLON, J., MÉNARD, T. et DEMOULIN, F. X., 2011  
Large eddy simulation of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, Volume 21 Numéro 9 pages 711–736. 112, 114, 116, 119, 132, 145, 146
- CHIGIER, N. et FARAGO, Z., 1992  
Morphological Classification of Disintegration of Round Liquid Jets in a Coaxial Air Stream. *Atomization and Sprays*, Volume 2 Numéro 2 pages 137–153. 13, 14, 195
- COUDERC, F., 2007  
*Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux*. Thèse de doctorat, Toulouse. 38, 41
- DELHAYE, J. M., 2001  
Some issues related to the modeling of interfacial areas in gas-liquid flows I. The conceptual issues. *Comptes Rendus de l'Academie de Sciences - Serie Iib : Mecanique*, Volume 329 Numéro 5 pages 397–410. 109
- DOISNEAU, F., 2013  
*Eulerian modeling and simulation of polydisperse moderately dense coalescing spray flows with nanometric-to-inertial droplets : application to Solid Rocket Motors François Doisneau*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris. 52
- DUCLOS, J. M., 1993  
A Comparison of Flamelet Models for Premixed Turbulent Combustion. *Combustion and Flame*, Volume 95 Numéro 1 pages 101–117. 110
- DUFOUR, G., 2005  
*Modélisation multi-fluide eulérienne pour les écoulements diphasiques à inclusions dispersées*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse. 53, 56, 57
- DUMOUCHEL, C., BLAISOT, J. B., ABUZHARA, F., SOU, A., GODARD, G. et IDLAHCEN, S., 2019  
Analysis of a textural atomization process. *Experiments in Fluids*, Volume 60 Numéro 8. 15, 90
- DUMOUCHEL, C. et GROUT, S., 2009  
Application of the scale entropy diffusion model to describe a liquid atomization process. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 35 Numéro 10 pages 952–962. 15
- DURET, B., REVEILLON, J., MENARD, T. et DEMOULIN, F. X., 2013  
Improving primary atomization modeling through DNS of two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 55 pages 130–137. 112
- EROGLU, H., CHIGIER, N. et FARAGO, Z., 1991  
Coaxial atomizer liquid intact lengths. *Physics of Fluids A*, Volume 3 Numéro 2 pages 303–308. 23, 202
- EVRRARD, F., DENNER, F. et VAN WACHEM, B., 2017  
Estimation of curvature from volume fractions using parabolic reconstruction on two-dimensional unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, Volume 351 pages 271–294. 35



- FDIDA, N. et BLAISOT, J. B., 2010  
Drop size distribution measured by imaging : Determination of the measurement volume by the calibration of the point spread function. *Measurement Science and Technology*, Volume 21 Numéro 2. 145
- FDIDA, N., VINGERT, L., MAURIOT, Y., DOREY, L. H. et THÉRON, M., 2019  
Comparison of LOX / Methane and LOX / Hydrogen cryogenic spray combustion with simultaneous optical diagnostics. *Eucass 2019*, pages 2–11. 33, 68, 195
- FEDKIW, R. P., ASLAM, T., MERRIMAN, B. et OSHER, S., 1999  
A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method). *Journal of Computational Physics*, Volume 152 Numéro 2 pages 457–492. 41
- FICUCIELLO, A., BLAISOT, J. B., RICHARD, C. et BAILLOT, F., 2017  
Investigation of air-assisted sprays submitted to high frequency transverse acoustic fields : Droplet clustering. *Physics of Fluids*, Volume 29 Numéro 6 pages 1–17. 24, 68, 70, 145, 147
- GEIGER, L. *et al.*, 2023  
Multiscale image analysis of primary atomisation in cryogenic liquid rocket engines. Issu de : *ECM*. 15
- GIBOU, F., FEDKIW, R. P., CHENG, L.-T. et KANG, M., 2002  
A second-order-accurate symmetric discretization of the Poisson equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, Volume 176 Numéro 1 pages 205–227. 41
- GLIMM, J., 1991  
Nonlinear and stochastic phenomena : the grand challenge for partial differential equations. *SIAM*, Volume 33 Numéro 4 pages 626–643. 34
- GRANGER, F., HOARAU, J. C., ZUZIO, D., DOREY, L. H. et ESTIVALÈZES, J. L., (soumis)  
Large-Eddy Simulation interface surface density model for assisted atomization in fiber regime. *International Journal of Multiphase Flow*. 108
- GROUT, S., DUMOUCHEL, C., COUSIN, J. et NUGLISCH, H., 2007  
Fractal analysis of atomizing liquid flows. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 33 Numéro 9 pages 1023–1044. 15, 77, 90
- HABIBALLAH, M., ORAIN, M., GRISCH, F., VINGERT, L. et GICQUEL, P., 2006  
Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the mascotte facility. *Combustion Science and Technology*, Volume 178 Numéro 1-3 pages 101–128. 70
- HARDI, J. S., BEINKE, S. K., OSCHWALD, M. et DALLY, B. B., 2014  
Coupling of cryogenic oxygen-hydrogen flames to longitudinal and transverse acoustic instabilities. *Journal of Propulsion and Power*, Volume 30 Numéro 4 pages 991–1004. 6
- HENDRICKSON, K., WEYMOUTH, G. D. et YUE, D. K. P., 2020  
Informed component label algorithm for robust identification of connected components with volume-of-fluid method. *Computers and Fluids*, Volume 197. 72
- HERBERT, D., SCHMIDT, D. et KNAUS, D., 2008  
Parallel VOF spray droplet identification in an unstructured grid. Issu de : *ILASS Americas*. 72
- HINZE, J. O., 1955  
Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes. *AIChE Journal*, Volume 1 Numéro 3 pages 289–295. 118

- HOARAU, J. C., DOREY, L. H., ZUZIO, D., GRANGER, F. et ESTIVALÈZES, J. L., (soumis)  
Direct numerical simulation of a subcritical coaxial injection in fiber regime using sharp interface reconstruction. *International Journal of Multiphase Flow*. URL : <https://hal.science/hal-04212765> . 67, 71, 72, 82, 117, 118, 119
- HOPFINGER, E. J., 1998  
Liquid jet instability and atomization in a coaxial gas stream. *Fluid Mechanics and its Applications*, Volume 46 pages 69–78. 13, 69, 195, 196
- IYER, V. et ABRAHAM, J., 2003  
An evaluation of a two-fluid Eulerian-liquid Eulerian-gas model for diesel sprays. *Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME*, Volume 125 Numéro 4 pages 660–669. 109
- IYER, V., ABRAHAM, J. et MAGI, V., 2001  
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*, Volume 45 Numéro 3 pages 519–531. 109
- J., C. A., 1968  
Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations. *Mathematics of computation*, Volume 22 Numéro 104 pages 745–762. 39
- JAY, S., LACAS, F. et CANDEL, S., 2006  
Combined surface density concepts for dense spray combustion. *Combustion and Flame*, Volume 144 Numéro 3 pages 558–577. 111
- JIANG, G.-S. et SHU, C.-W., 1996  
Efficient implementation of weighted ENO schemes. *Journal of Computational Physics*, Volume 126 Numéro 126 pages 202–228. 41
- JONES, W. et LAUNDER, B., 1972  
The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 15 pages 301–314. 30
- KANG, M., FEDKIW, R. P. et LIU, X.-D., 2000  
A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *Journal of Scientific Computing*, Volume 15 Numéro 3 pages 323–360. 42
- KAYE, B. H., 1994  
*A Random Walk Through Fractal Dimensions*. Numéro 2. 15
- KHANWALE, M. A., SAURABH, K., ISHII, M., SUNDAR, H. et GANAPATHYSUBRAMANIAN, B., 2022  
Breakup dynamics in primary jet atomization using mesh- and interface- refined Cahn-Hilliard Navier-Stokes. 42
- KOLMOGOROV, A. N., 1941  
Dissipation of energy in the localy isotropic turbulence. Issu de : *Mathematical and Physical Sciences*, volume 434. 11, 195
- LABOIS, M., 2008  
*Modélisation des déséquilibres mécaniques dans les écoulements diphasiques : Approches par relaxation et par modèle réduit*. Thèse de doctorat, Provence. 42, 44
- LASHERAS, J. C., VILLERMAUX, E. et HOPFINGER, E. J., 1998  
Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 357 pages 351–379. 23, 202

- LAURENT, F. et MASSOT, M., 2001  
 Multi-fluid modelling of laminar polydisperse spray flames : Origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion Theory and Modelling*, Volume 5 Numéro 4 pages 537–572. 52, 53
- LE TOUZE, C., 2015  
*Couplage entre modèles diphasiques à phases séparées et à phase dispersée pour la simulation de l'atomisation primaire en combustion cryotechnique*. Thèse de doctorat, Université Nice Sophia Antipolis. 23, 42, 44, 45, 48, 49, 52, 53, 54, 58, 59, 60, 62, 63, 64, 147, 196, 199
- LE TOUZE, C., DOREY, L. H., RUTARD, N. et MURRONE, A., 2020  
 A compressible two-phase flow framework for Large Eddy Simulations of liquid-propellant rocket engines. *Applied Mathematical Modelling*, Volume 84 pages 265–286. 68
- LE TOUZE, C., MURRONE, A. et GUILLARD, H., 2015  
 Multislope MUSCL method for general unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, Volume 284 pages 389–418. 49
- LE TOUZE, C. et RUTARD, N., 2022  
 Numerical methods for diffuse interface multifluid models. Issu de : *ECCOMAS*. 49
- LEBAS, R., BLOKKEEL, G., BEAU, P. A. et DEMOULIN, F. X., 2005  
 Coupling vaporization model with the eulerian-lagrangian spray atomization (ELSA) model in diesel engine conditions. *SAE Technical Papers*, Volume 2005 Numéro 724. 112
- LEBAS, R., MENARD, T., BEAU, P. A., BERLEMONT, A. et DEMOULIN, F. X., 2009  
 Numerical simulation of primary break-up and atomization : DNS and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 35 Numéro 3 pages 247–260. 111, 112
- LEROUX, B., DELABROY, O. et LACAS, F., 2007  
 Experimental study of coaxial atomizers scaling. Part I : Dense core zone. *Atomization and Sprays*, Volume 17 Numéro 5 pages 381–407. 23, 24, 202
- LOISON, A., PICHARD, T., KOKH, S. et MASSOT, M., (soumis)  
 Two-scale modelling of two-phase flows based on the Stationary Action Principle and a Geometric Method Of Moments. 147
- LÓPEZ, J. et HERNÁNDEZ, J., 2008  
 Analytical and geometrical tools for 3D volume of fluid methods in general grids. *Journal of Computational Physics*, Volume 227 Numéro 12 pages 5939–5948. 35, 74
- MALMSTRÖM, T. G., KIRKPATRICK, A. T., CHRISTENSEN, B. et KNAPPMILLER, K. D., 1997  
 Centreline velocity decay measurements in low-velocity axisymmetric jets. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 346 pages 363–377. 120, 121
- MARBLE, F. et BROADWELL, J., 1977  
 The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reactions. Rapport technique, Purdue University. 110
- MARIĆ, T., KOTHE, D. B. et BOTHE, D., 2020  
 Unstructured un-split geometrical volume-of-fluid methods – a review. *Journal of Computational Physics*, Volume 420. 42
- MARMOTTANT, P., 2001  
*Atomisation d'un jet liquide par un courant gazeux*. Thèse de doctorat, Polytechnique Institute of Grenoble. 16, 17, 19, 195

- MARMOTTANT, P. et VILLERMAUX, E., 2004a  
Fragmentation of stretched liquid ligaments. *Physics of Fluids*, Volume 16 Numéro 8 pages 2732–2741. 19
- MARMOTTANT, P. et VILLERMAUX, E., 2004b  
On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 498 Numéro 498 pages 73–111. 17, 18, 19, 20, 24, 117, 195
- MARTER, I., 2017  
*Méthode d'interface immergée pour la simulation directe de l'atomisation primaire*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse. 38, 70
- MASSOT, M., LAURENT, F., KAH, D. et DE CHAISEMARTIN, S., 2010  
A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Volume 70 Numéro 8 pages 3203–3234. 53
- MENTER, F. R., 1993  
Zonal two equation  $k-\omega$  turbulence models for aerodynamic flows. Issu de : *23rd fluid dynamics, plasmadynamics, and lasers conference*. 32
- MOREL, C., GOREAUD, N. et DELHAYE, J. M., 1999  
The local volumetric interfacial area transport equation : Derivation and physical significance. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 25 Numéro 6-7 pages 1099–1128. 109
- NICOLE, A., DOREY, L. H. et RUTARD, N., 2019  
Simulation de flamme diphasique excitée haute fidélité. Rapport technique. 68, 70
- NICOUD, F., TODA, H. B., CABRIT, O., BOSE, S. et LEE, J., 2011  
Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations. *Physics of Fluids*, Volume 23 Numéro 8. 88
- NOH, W. F. et P., W., 1976  
SLIC (Simple Line Interface Calculation) Issu de : *Fifth International Conference on Numerical Method in Fluid Dynamics* (éditeur : VAN DE VOOREN, A. I.), pages 330–340, Berlin, Heidelberg, 1976. Springer Berlin Heidelberg. 35
- O'ROURKE, P. J., 1981  
*Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. Thèse de doctorat, Princeton. 50
- O'ROURKE, P. J. et AMSDEN, A. A., 1987  
The TAB method for numerical calculation of spray droplet breakup. Issu de : *International Fuels nad Lubricants Meeting and Exposition*, Toronto, 1987. 111
- OSHER, S. et SETHIAN, J. A., 1988  
Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, Volume 79 Numéro 1 pages 12–49. 36
- PANÃO, M. R. O., 2023  
Why drop size distributions in sprays fit the lognormal. *Physics of Fluids*, Volume 35 Numéro 1. 79
- PAPAMOSCHOU, D. et ROSHKO, A., 1988  
The compressible turbulent shear layer : An experimental study. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 197 Numéro 1973 pages 453–477. 16, 125, 202
- PILCH, M. et ERDMAN, C. A., 1987  
Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 13 Numéro 6 pages 741–757. 20, 21, 22, 111, 117, 118, 132, 195

- POINSOT, T. et VEYNANTE, D., 2012  
*Theoretical and Numerical Combustion*. 45
- POPE, S. B., 1988  
 The evolution of surfaces in turbulence. *International Journal of Engineering Science*, Volume 26 Numéro 5 pages 445–469. 110
- POUGATCH, K., McMILLAN, J. et SALCUDEAN, M., 2011  
 Average droplet diameter spatial distribution in a spray after gas-assisted premixed atomization. *Atomization and Sprays*, Volume 21 Numéro 8 pages 687–709. 55
- POULIQUEN, O., CHOMAZ, J. M. et HUERRE, P., 1994  
 Propagating Holmboe Waves at the Interface Between Two Immiscible Fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 266 pages 277–302. 17
- RAYLEIGH, F. R. S., 1879  
 On the Stability, or Instability, of certain Fluid Motions. *Proceedings of the London Mathematical Society*, Volume s1-11 Numéro 1 pages 57–72. 17
- REITZ, R. D. et BRACCO, F. V., 1986  
 Mechanisms of Breakup of Round Liquid Jets. *The Encyclopedia of Fluid Mechanics*, Volume 3 pages 223–249. 23
- RENARDY, Y. et RENARDY, M., 2002  
 PROST : A parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *Journal of Computational Physics*, Volume 183 Numéro 2 pages 400–421. 35
- REY, C., DUCRUIX, S., RICHECOEUR, F., SCOUFLAIRE, P., VINGERT, L. et CANDEL, S., 2004  
 High frequency combustion instabilities associated with collective interactions in liquid propulsion. *40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, pages 1–13. 6
- RUTARD, N., 2019  
*Simulation numérique et modélisation de l'influence d'ondes acoustiques de haute amplitude sur un jet diphasique : application au domaine de la propulsion fusée*. Thèse de doctorat, Paris Saclay. 6, 23, 24, 58, 63, 88, 147, 195
- RUTARD, N., DOREY, L. H., LE TOUZE, C. et DUCRUIX, S., 2020  
 Large-eddy simulation of an air-assisted liquid jet under a high-frequency transverse acoustic forcing. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 122. 68, 132
- SAGAUT, P., 2006  
*Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Numéro 3. Springer Berlin, Heidelberg. 32
- SAUREL, R. et PANTANO, C., 2018  
 Diffuse-Interface Capturing Methods for Compressible Two-Phase Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Volume 50 pages 105–130. 49
- SCHILLER, L. et NAUMANN, Z., 1935  
 A drag Coefficient Correlation. *VDI Zeitung*, Volume 77 pages 318–320. 55, 120
- SHIH, T.-H., LIOU, W. W., SHABBIR, A., YANG, Z. et ZHU, J., 1995  
 A New k- eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows. *Computers Fluids*, Volume 24 Numéro 3 pages 227–238. 31
- SIBRA, A., 2015  
 Modélisation et étude de l'évaporation et de la combustion de gouttes dans les moteurs à propergol solide par une approche eulérienne Multi-Fluide. 52

- SIBRA, A., DUPAYS, J., MURRONE, A., LAURENT, F. et MASSOT, M., 2017  
Simulation of reactive polydisperse sprays strongly coupled to unsteady flows in solid rocket motors : Efficient strategy using Eulerian Multi-Fluid methods. *Journal of Computational Physics*, Volume 339 pages 210–246. 53
- SMAGORINSKY, J., 1963  
General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, Volume 91 Numéro 3 pages 731–732. 32
- SUSSMAN, M., 1994  
A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. 37
- SUSSMAN, M. et PUCKETT, E. G., 2000  
A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows. *Journal of Computational Physics*, Volume 162 Numéro 2 pages 301–337. 37
- TARJAN, R., 1972  
Depth-first search and linear graph algorithms. *SIAM journal on computing*, Volume 1 Numéro 2 pages 146–160. 91
- TRELEAVEN, N. C. W. *et al.*, 2022  
*Coupling of Combustion Simulation with Atomisation and Filming Models for LES in Swirled Spray Flames*, volume 109. Springer Netherlands. 49
- URBANO, A. et SELLE, L., 2017  
Driving and damping mechanisms for transverse combustion instabilities in liquid rocket engines. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 820 pages 1–12. 6
- VALLET, A. et BORGHI, R., 1999  
Modélisation eulerienne de l'atomisation d'un jet liquide. *Comptes Rendus de l'Académie de Sciences - Serie IIB : Mécanique, Physique, Chimie, Astronomie*, Volume 327 Numéro 10 pages 1015–1020. 110
- VALLET, A., BURLUKA, A. A. et BORGHI, R., 2001  
Development of a Eulerian model for the "Atomization" of a liquid jet. *Atomization and Sprays*, Volume 11 Numéro 6 pages 619–642. 110, 111, 112, 113
- VILLERMAUX, E., 1998  
Mixing and spray formation in coaxial jets. *Journal of Propulsion and Power*, Volume 14 Numéro 5 pages 807–817. 23, 24, 202
- VILLERMAUX, E., MARMOTTANT, P. et DUPLAT, J., 2004  
Ligament-Mediated Spray Formation. *Physical Review Letters*, Volume 92 Numéro 7 pages 1–4. 19
- VIOLLET, P. L. et SIMONIN, O., 1994  
Modelling dispersed two-phase flows : Closure, validation and software development. *Applied Mechanics Reviews*, Volume 47 Numéro 6 pages S80–S84. 56
- WALLIS, G. B., 1969  
*One-dimensional two-phase flow*, Graham B. Wallis, McGraw-Huill, New York(1969). 49
- WERT, K. L., 1995  
A rationally-based correlation of mean fragment size for drop secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 21 Numéro 6 pages 1063–1071. 56



- WILCOX, D. C., 1988  
Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA Journal*, Volume 26 Numéro 11 pages 1299–1310. 31
- WILCOX, D. C., 2006  
*Turbulence Modeling for CFD*. Numéro 3. 31
- WILLIAMS, F. A., 1958  
Spray combustion and atomization. *Physics of Fluids*, Volume 1 Numéro 6 pages 541–545. 49
- YAKHOT, V., ORSZAG, S. A., THANGAM, S., GATSKI, T. B. et SPEZIALE, C. G., 1992  
Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. *Physics of Fluids A*, Volume 4 Numéro 7 pages 1510–1520. 31
- YOUNGS, D. L., 1982  
Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics*. 35
- YULE, A. J., 1972  
Two-Dimensional Self-Preserving Turbulent Mixing Layers At Different Free Stream Velocity Ratios Two-Dimensional Self-Preserving Turbulent Mixing Layers At Different Free Stream Velocity Ratios. Rapport technique, Manchester University. 16, 202
- ZUZIO, D., 2011  
*Direct numerical simulation of two phase flows with adaptive mesh refinement*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse. 36, 37, 38, 195
- ZUZIO, D., ESTIVALÈZES, J. L. et DIPIERRO, B., 2018  
An improved multiscale Eulerian–Lagrangian method for simulation of atomization process. *Computers and Fluids*, Volume 176 pages 285–301. 38
- ZUZIO, D., ORAZZO, A., ESTIVALÈZES, J. L. et LAGRANGE, I., 2020  
A new efficient momentum preserving Level-Set/VOF method for high density and momentum ratio incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Volume 410 pages 109342. 38, 39