

## Modélisation stochastique de l'atomisation primaire et secondaire couplée à la LES

Julien Jouanguy<sup>1</sup>, Anna Chtab<sup>1</sup> & Mikhael Gorokhovski<sup>2</sup>

<sup>1</sup>CORIA UMR 6614 CNRS University of Rouen,  
Site Universitaire du Madrillet BP 12, 76801 Saint Etienne du Rouvray, France

<sup>2</sup>LMFA UMR 5509 CNRS Ecole Centrale de Lyon,  
36 avenue Guy de Collongue, 69131 Ecully Cedex, France  
email de l'auteur à contacter : [juanguy@coria.fr](mailto:juanguy@coria.fr)

### Résumé :

*Ce travail présente un modèle d'atomisation primaire assistée par gaz dans un spray turbulent à fort nombre de Weber. L'atomisation primaire est simulée de façon stochastique : la diminution de l'épaisseur du coeur liquide dans la direction transverse à l'écoulement est gouvernée par la fragmentation avec hypothèse de symétrie d'échelle. A partir des statistiques du coeur liquide au voisinage de l'injecteur, des gouttes sont formées en utilisant une distribution présumée et en respectant la conservation de la masse. Les gouttes sont soumises à l'atomisation secondaire et à la coalescence. Ces phénomènes sont simulés de façon stochastique comme résultant des collisions entre gouttelettes. La modélisation du spray est couplée à la simulation des grandes échelles pour la phase gazeuse. Les résultats de calculs sont comparés aux travaux expérimentaux : pour la distribution de présence de liquide au voisinage de l'injecteur ; et loin de l'injecteur, pour le diamètre de Sauter moyen.*

### Abstract :

*This work presents a model of primary air-blast atomization in a high Weber number turbulent spray. In this model, the primary atomization is simulated stochastically: the reducing of thickness of the liquid core in down-stream direction is governed by fragmentation under scaling symmetry. From statistics of liquid bulk in the vicinity of injector, the liquid drops are sampled using presumed distribution of size and conservation of the liquid mass. The drops are subjected to the secondary atomization and coalescence. These two phenomena are simulated stochastically as result issued from inter-drop collision. The spray modelling is coupled with LES computation in the gaseous flow. The results of computation are compared with measurements: for the distribution of liquid fraction in the vicinity of injector (at different inlet velocities of the gas and the liquid); and in the far-field of the spray, for the mean Sauter diameter.*

**Mots-clefs : atomisation ; modélisation stochastique ; simulation des grandes échelles**

### 1 Introduction

La fragmentation joue un rôle important dans de nombreux processus physiques, chimiques et géologiques. On peut citer par exemple l'atomisation dans les sprays, la fragmentation des roches, la dégradation des polymères, la cascade turbulente, etc .... Même si chacun des événements de fragmentation est un processus très complexe, leur fréquence est élevée. Dans une telle situation, il est naturel de proposer un scénario effectif simplifié pour la fragmentation et de représenter ses caractéristiques essentielles, indépendamment du détail de chaque brisure élémentaire. Une approche possible est l'hypothèse de symétrie d'échelle pour la fragmentation. Ici, chaque processus de fragmentation réduit la taille typique des fragments d'un multiple aléatoire, qui est gouverné par le spectre d'intensité de fragmentation. Même si ce spectre est en principe une fonction inconnue, la fragmentation avec symétrie d'échelle est caractérisée par des universalités statistiques. Pour une forme initiale arbitraire du spectre de fragmentation, la distribution initiale d'échelle de longueur tend (mais ne devient jamais) vers une distribution finale de Dirac en passant par au moins deux état asymptotiques intermédiaires. Le premier est

la distribution log-normale de Kolmogorov 1941 (première universalité avec deux paramètres-les deux premiers moments logarithmiques du spectre d'intensité de fragmentation). La deuxième est la fonction puissance (universalité plus forte avec un paramètre qui est le rapport des deux moments logarithmiques du spectre de fragmentation). La première universalité permet de réduire l'équation d'évolution à une équation de Fokker-Planck de façon exacte. La seconde universalité implique le comportement fractal de la fragmentation à longue échéance. Ces universalités ont été identifiées par Gorokhovski *et al* (2003) et Saveliev *et al.* (2005). Dans cet article, nous formulons d'abord le processus stochastique associé à la fragmentation sous l'hypothèse de symétrie d'échelle sous la forme d'une équation log-Brownienne avec une force constante. Ensuite nous appliquons ce modèle à l'atomisation primaire assistée par air à fort nombre de Weber.

## 2 Symétrie d'échelle et processus stochastique log-Brownien avec une force constante.

Sous l'hypothèse de symétrie d'échelle, la fragmentation réduit l'échelle typique,  $r \Rightarrow \alpha r$ , par un multiplicatif aléatoire indépendant  $\alpha$ , qui est gouverné par le spectre d'intensité de fragmentation  $q(\alpha)$ ,  $\int_0^1 q(\alpha) d\alpha = 1$ . Si la fréquence de fragmentation,  $\nu$ , est indépendante de

$r$ , Gorokhovski *et al* (2003) ont montré que l'évolution de la fonction de distribution normalisée  $f(r)$  obéit à une équation de Fokker Planck. La résolution de cette équation nécessite la connaissance des deux premiers moments logarithmiques de  $q(\alpha)$ . Leur rapport  $\langle \ln^2 \alpha \rangle / \langle \ln \alpha \rangle$  indique une échelle de longueur typique dans l'espace de  $x = \ln r$  Gorokhovski

$$(2003): \frac{\langle \ln^2 \alpha \rangle}{\langle \ln \alpha \rangle} = \ln \left( \frac{r_{cr}}{r_*} \right) \quad (1)$$

où  $r_{cr}$  est l'échelle critique et  $r_*$  est l'échelle à partir de laquelle le phénomène de fragmentation doit être pris en compte. Pour la variable stochastique  $r$ , la forme générale de l'équation de Langevin associée à la fragmentation avec symétrie d'échelle est (Risken (1989)):

$$\dot{r} = \nu \langle \ln \alpha \rangle r + \sqrt{\nu \langle \ln^2 \alpha \rangle / 2} r \Gamma(t) \quad (2)$$

où  $\Gamma(t)$  est la force de Langevin supposée aléatoire distribuée de façon Gaussienne avec  $\langle \Gamma(t) \rangle = 0$ ;  $\langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle = 2\delta(t-t')$ . Cette équation stochastique correspond au mouvement Brownien classique avec une force constante dans l'espace des  $x = \ln r$  et le détail de son obtention peut être trouvé dans Gorokhovski *et al.* 2006.

## 3 Modèle d'atomisation primaire assisté par air à grand nombre de Weber.

### 3.1 Particules stochastiques.

Quand un jet liquide est injecté à faible vitesse dans un milieu gazeux en mouvement, la physique de la fragmentation est très complexe (cisaillement de la masse liquide et génération de vorticit , instabilit s sur l'interface liquide/gaz, entra nement des filaments de liquide par l' coulement de gaz avec instabilit , collisions, coalescence). Sur la Fig. 1, les diff rentes r alisations d'un jet liquide atomis  dans cette situation sont repr sent es sch matiquement. Afin de formuler le mod le, nos hypoth ses sont les suivantes: (i) A des instants diff rents, les configurations g om triques du coeur liquide repr sentent un ensemble de r alisations ind pendantes ;(ii) l' paisseur instantan e d'une r alisation dans la direction de l' coulement est

indépendante de sa valeur en amont (hypothèse de symétrie d'échelle);(iii) pour chaque réalisation, l'évolution stochastique du jet liquide est pilotée par l'instabilité de Kelvin Helmholtz ;(iv) la contribution des fragments détachés du cœur liquide est négligée.

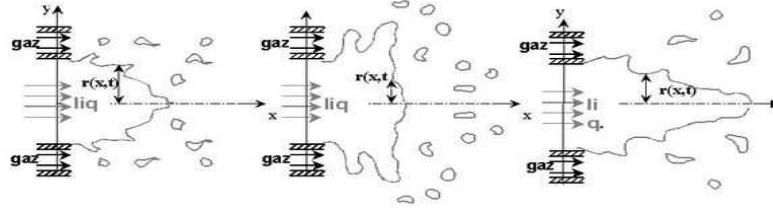


Fig.1 Schéma des différentes réalisations géométriques dans l'atomisation assistée par air.

Afin de réaliser (ii), on introduit une particule stochastique se déplaçant dans l'espace physique. Celle-ci est appelée "floating cutter". Sa trajectoire représente une réalisation du cœur liquide. Son mouvement est gouverné par le processus stochastique associé à la fragmentation avec symétrie d'échelle. Il s'arrête quand le temps de vie défini par la compétition entre l'échange de quantité de mouvement et l'inertie du jet liquide de cette particule est écoulé :

$$\tau_{life} = \sqrt{\frac{|\rho_g u_{g0}^2 - \rho_l u_{l0}^2|}{2\rho_l}} \frac{1}{d_0} \quad (3)$$

Ici  $\rho_g u_{g0}^2/2$  et  $\rho_l u_{l0}^2/2$  sont les quantités de mouvement initiales dans les phases gazeuse et liquide, respectivement;  $\rho_l$  est la masse volumique du liquide;  $d_0$  est le diamètre de l'injecteur. Afin de satisfaire (i), on injecte à chaque pas de temps un "floating cutter"; chacune des trajectoires de ces particules représente une réalisation géométrique indépendante du cœur liquide. En accord avec (iv), les statistiques de ces géométries seront utilisées pour former des parcelles. Dans la direction radiale, la vitesse et la position de la particule ayant pour indice  $i$  sont définies par :

$$V_{ip} = v \langle \ln \alpha \rangle r_i + \sqrt{v \langle \ln^2 \alpha \rangle / 2} r_i \Gamma(t) \quad \text{et} \quad \frac{dr_i}{dt} = V_{ip} \quad (4)$$

dans la direction axiale, on suppose que l'accélération du "floating cutter" est contrôlée par le gradient d'énergie cinétique associée au mouvement relatif entre le liquide et le gaz.

$$\frac{dU_{ip}}{dt} = \frac{1}{2} \frac{\rho_g}{\rho_l} (u_g - U_{ip}) \left| u_g - U_{ip} \right| \frac{1}{r_i} \quad \text{et} \quad \frac{dx_{ip}}{dt} = U_{ip} \quad (5)$$

où  $u_g$  et  $\rho_g$  sont respectivement la vitesse locale résolue et la masse volumique dans l'écoulement de gaz. Les conditions initiales pour (4)-(5) sont :  $r(t=0) = r_0$  ;  $x_{ip}(t=0) = 0$  ;  $V_{ip}(t=0) = 0$  et  $U_{ip}(t=0) = u_{l0}$  où  $u_{l0}$  est la vitesse initiale du jet liquide et  $r_0$  est le rayon de l'injecteur. L'hypothèse (iii) permet d'obtenir les paramètres du modèles. En effet, La longueur d'onde du mode le plus instable peut être déterminée en fonction de l'épaisseur de vorticit  dans le gaz  $\delta_g$  (Marmottant 2001, Hong 2003) que nous associerons   la taille minimale des gouttes form es :

$$\lambda_{KH} \approx C_{KH} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \delta_g \quad (6)$$

où  $C_{KH} = 2$  (Marmottant 2001). En utilisant l'Eq. (6), l'expression (1) s'écrit, avec  $const$

$$\text{fixée à } 0.01: \quad \frac{\langle \ln^2 \alpha \rangle}{\langle \ln \alpha \rangle} = \ln \left( \frac{1}{C_{KH}} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \right) \text{ et } \langle \ln \alpha \rangle = const \ln \left( \frac{1}{C_{KH}} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \right) \quad (7)$$

### 3.2 Simulation des grandes échelles de la phase gazeuse.

L'écoulement de gaz est résolu par une approche LES en utilisant le code numérique CTR/Stanford décrit par Pierce 2001. Ce code résout les équations de Navier Stokes incompressibles filtrées en trois dimensions. Le terme de transport de quantité de mouvement de sous-maille a été modélisé par l'approche dynamique de Germano (Germano et al. 1991). Ce code a été validé avec des résultats de DNS et d'expériences dans des jets (Boersma et al. 1998, Panchepakesan et al. 1993).

### 3.3 Statistiques de fraction de liquide au voisinage de l'injecteur coaxial.

L'expérience de Werquin 2001 permet d'obtenir la distribution moyenne de fraction de liquide près de l'injecteur. Pour deux valeurs différentes du paramètre  $M = \rho_g u_{g0}^2 / \rho_l u_{l0}^2$ , la Fig.2 montre cette distribution en comparaison avec la simulation stochastique selon les équations (5)-(10). On observe que qualitativement, le modèle reproduit les observations expérimentales.

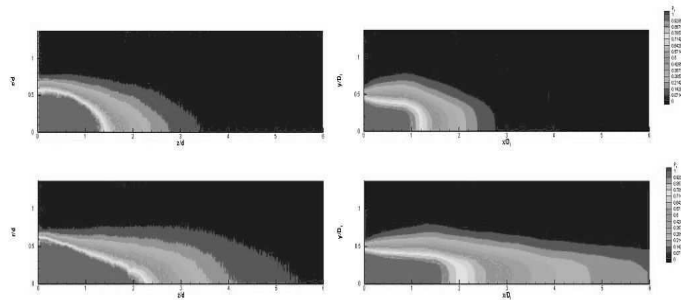


Fig.2. Distribution de fraction de liquide au voisinage de l'injecteur mesurée (à gauche) et simulée (à droite) (la vitesse initiale du coflow est  $60 \text{ m/s}$  ; la vitesse initiale du jet liquide est en haut de la figure; et  $1.36 \text{ m/s}$  en bas de la figure).

### 3.4 Atomisation secondaire et coalescence.

La distribution spatiale de liquide non fragmenté calculée est utilisée pour former des gouttes. Celles-ci sont tirées d'une distribution exponentielle dans les zones où la probabilité de trouver le cœur liquide est comprise entre 0.1 et 0.9. L'échelle typique associée est calculée à partir de l'équilibre entre l'énergie turbulente, et le travail des forces de tension de surface (Kolmogorov 1949, Gorokhovski 2001). L'expression pour la dissipation visqueuse conditionnée par la présence du liquide (Lasheras et al. 1998) est utilisée pour définir l'échelle typique. La procédure de formation des gouttes est organisée de sorte que la masse de liquide injectée soit instantanément conservée. Les gouttes interagissent avec le champ de vitesse résolu du gaz  $\vec{u}_g$ , conditionné par la présence du liquide non fragmenté  $\langle \vec{u}_g \rangle_l = u_g (1 - P_l) + u_{l0} P_l$  où  $P_l$  est la probabilité de trouver le cœur liquide. Les détails de la modélisation stochastique de l'atomisation secondaire et de la coalescence peuvent être trouvés dans Vinkovic et al. 2005. Dans ce modèle, la coalescence et la fragmentation sont liées aux collisions entre gouttes. La

fréquence de collision est calculée par l'approche de O'Rourke 1981. L'avenir d'une collision est déterminé par le nombre de Weber basé sur les caractéristiques des gouttes en collision.

### 3.5 Procédure de simulation.

La procédure numérique comprend plusieurs étapes: (a) Simulation LES de l'écoulement gazeux jusqu'à l'état statistiquement stationnaire; (b) Simulation de la fraction de liquide au voisinage de l'injecteur et conditionnement de la vitesse du gaz; (c) formation de gouttes; transport par le champ de vitesse du gaz conditionné, simulation de l'atomisation secondaire et de la coalescence; (d) vérification de l'état statistiquement stationnaire.

### 3.6 Exemples de calculs et comparaison dans le champ lointain du spray.

Les Figures 3 et 4 montrent des simulations de fragmentation dans les conditions des travaux expérimentaux de Lasheras et al. 1998. Pour différentes positions axiales, la Fig. 4 montre des comparaisons avec les résultats expérimentaux sur le diamètre de Sauter moyen. On peut voir que pour différentes vitesses d'injection, le diamètre est prédit de façon relativement bonne. La Figure 3 montre la distribution des fragments liquides ainsi que le champ de vitesse du gaz conditionné pour différentes valeurs du paramètre  $M$ . On remarque que le modèle ne peut pas reproduire la structure filamentaire du jet liquide; il représente statistiquement la distribution des échelles de liquide atomisées dans l'écoulement. Les distributions sur la Fig.3 sont en accord avec l'intuition physique: avec l'augmentation du paramètre  $M$ , le cœur liquide devient plus petit, la taille des fragments diminue. Ces fragments sont entraînés par l'écoulement de gaz, et le champ lointain est alimenté par des échelles de taille en accord relatif avec les mesures (Fig. 4). La distribution de fraction massique de liquide est donnée sur la Fig.5. L'angle du spray calculé correspond aux résultats de Villermaux 1998.

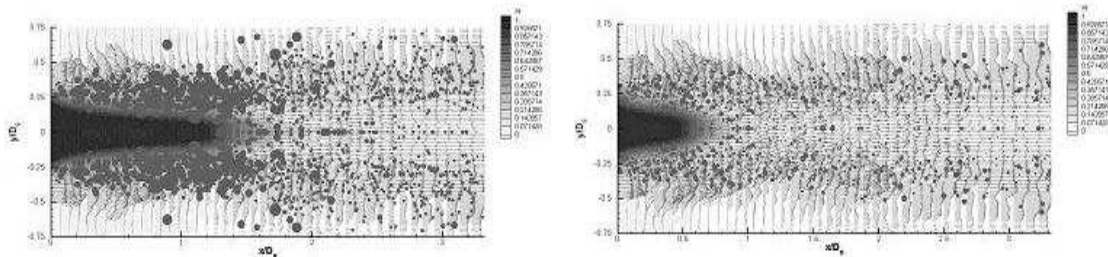


Fig. 3. Jet liquide injecté dans un coflow de gaz à forte vitesse ( $u_{g0} = 140 \text{ m/s}$ ) pour différentes vitesses d'injection ( $u_{l0} = 0.33 \text{ m/s}$  et  $u_{l0} = 2.8 \text{ m/s}$ ).

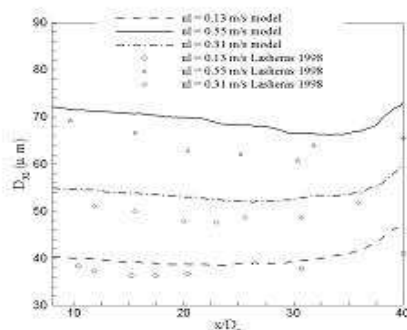


Fig.4. Comparisons du  $D_{32}$  calculé avec les mesures de Lasheras et al. 1998  $u_{g0} = 140 \text{ m/s}$ .

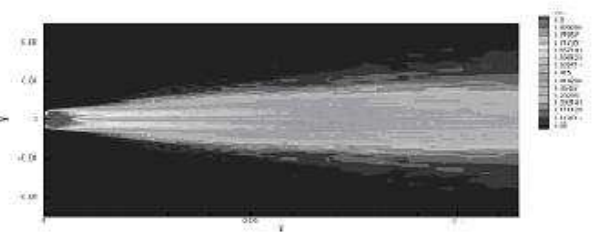


Fig. 5. Fraction de liquide calculée dans le spray assisté par air.

Un modèle simple pour l'atomisation primaire assisté par air dans un spray turbulent caractérisé par un grand nombre de Weber est proposé. Dans ce modèle, la fragmentation du jet liquide est simulée de façon stochastique. Cette fragmentation est supposée assez rapide pour que l'évolution de l'épaisseur du cœur liquide soit gouvernée par la fragmentation avec hypothèse de symétrie d'échelle. A partir des statistiques basées sur les réalisations géométriques du cœur liquide au voisinage de l'injecteur, des gouttes sont formées en utilisant une distribution présumée de tailles et la conservation du débit massique. Les gouttes sont soumises à l'atomisation secondaire et à la coalescence. Ces deux phénomènes sont simulés de façon stochastique comme le résultats des collisions entre gouttes. La modélisation stochastique du spray est couplée à la LES pour la phase gazeuse: à chaque pas de temps, le champ de vitesse du gaz calculé est conditionné par la fraction de liquide au voisinage de l'injecteur. Ce champ de vitesse conditionné contrôle la dynamique des gouttes produites. Les résultats de calcul pour différentes conditions initiales représentent qualitativement les résultats expérimentaux.

### Références

- M. Gorokhovski and V. Saveliev. Further Analyses of Kolmogorov's Model of Breakup. *J. Physics of Fluids*, 15(1): 184-192, 2003.
- V. Saveliev and M. Gorokhovski. Group-theoretical model of developed turbulence and renormalization of Navier-Stokes equations. *Phys. Rev. E* 72, 016302, 2005.
- M. Gorokhovski. Scaling Symmetry Universality and Stochastic Formulation of Turbulent Cascade With Intermittency. In *Annual Research Briefs in Center of Turbulence (Edited by B. Reynolds and J.H. Ferziger)*, pp. 197-204, Stanford University, 2003.
- H. Risken. *The Fokker-Planck Equation*, 2<sup>nd</sup> ed., Springer, Berlin, 1989.
- M. Gorokhovski, J. Jouanguy, A. Chtab. LES with stochastic simulation of primary and secondary air blest atomisation ICLASS 2006, Kyoto
- E.J. Hopfinger. In *Combustion dans les moteurs fusées Acte du Colloque de Synthèse du groupe de Recherche CNES/CNRS/ONERA/SNECMA*, pp.34-47, 2001.
- P.H. Marmottant. Atomisation d'un liquide par un courant gazeux, Thèse de doctorat, Université de Grenoble, France, 2001.
- M. Hong. Atomisation et mélange dans les jets coaxiaux liquide-gaz, Thèse de doctorat, Université de Grenoble, France, 2003.
- C.D. Pierce. Progress-variable approach for large-eddy simulation of turbulent combustion, PhD thesis, Stanford University, USA, 2001.
- M. Germano, U. Piomelli, P. Moin and W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A* 3(7): 1760, 1991.
- B.J. Boersma, G. Brethouwer and F.T.M. Nieuwstadt. A numerical investigation on the effect of the infow conditions on the self-similar region of a round jet. *Phys. Fluids* 10(4): 899-909, 1998.
- N.R. Panchevakesan and J.L. Lumley. Turbulence measurements in axisymmetric jets of air and helium. Part 1. Air jet. *J. Fluid Mech* 246: 197, 1993.
- O. Werquin. Diagnostics des scalaires par plan laser dans les jets diphasiques denses. PhD thesis, University of Rouen, France, 2001.
- A.N. Kolmogorov. On the Drops Breakup in the Turbulent Flow. *Gidromekhanika, DAN*, LXVI, NS: 825-828, 1949.
- M. Gorokhovski. The Stochastic Sub-Grid-Scale Approach for Spray Atomization. *J. Atomization and Sprays*, 11: 505-519, 2001.
- J.C. Lasheras, E. Villermaux and E.J. Hopfinger. Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet; *J. Fluid Mech.* 357: 351-379, 1998.
- I. Vinkovic, C. Agguire, S. Simoens and M. Gorokhovski. Large eddy simulation of droplet dispersion for inhomogeneous turbulent wall flow. *Int. J. of Multiphase Flow*, 32/3: 344-364, 2005.
- P.J. O'Rourke. Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays. Ph. D Thesis 1532-T, Princeton University, USA, 1981.
- E. Villermaux. Mixing and spray formation in coaxial jets. *Journal of Propulsion and Power* 14(5): 807-817, 1998.