



# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité : *Énergétique, Mécanique des Fluides*

---

Présentée et soutenue par *Lionel MARTINEZ*

Le 15 septembre 2009

**Titre :**

*Simulation aux grandes échelles de l'injection de carburant liquide dans les moteurs à combustion interne*

---

### JURY

<i>Jacques Borée</i>	<i>Professeur à l'ENSMA</i>	<i>Président</i>
<i>Marc Massot</i>	<i>Professeur à l'École Centrale Paris</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Julien Réveillon</i>	<i>Professeur à l'Université de Rouen</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Olivier Simonin</i>	<i>Professeur à l'INP de Toulouse</i>	<i>Examineur</i>
<i>Adlène Benkenida</i>	<i>Adjoint au directeur du Centre Moteurs-Énergie, IFP</i>	<i>Examineur</i>
<i>Grégory Blokkeel</i>	<i>Ingénieur de Recherche, PSA</i>	<i>Examineur</i>
<i>Bénédicte Cuenot</i>	<i>Chercheur au CERFACS</i>	<i>Directrice de thèse</i>

---

**École doctorale :** *Mécanique, Énergétique, Génie civil et Procédés (MEGeP)*

**Unité de recherche :** *IFP*

**Directrice de Thèse :** *Bénédicte Cuenot*



# Remerciements

Mes remerciements vont en premier lieu à mes encadrants de thèse, à savoir Adlène Benkenida de l'IFP et Bénédicte Cuenot du CERFACS. L'attention portée à mon encadrement ainsi que leur grande expérience et leur sérieux ont largement contribué à la réussite de cette thèse.

Je remercie également l'ensemble des membres du jury pour avoir accepté d'évaluer mon travail et pour avoir interagi avec moi lors de la soutenance. Merci à Jacques Borée pour avoir présidé le Jury, aux rapporteurs Marc Massot et Julien Réveillon pour avoir pris le temps de décortiquer mon manuscrit, à Olivier Simonin pour ses questions très pertinentes et Gregory Blokkeel pour avoir accepté de donner un point de vue industriel à mon travail.

J'adresse également toute ma gratitude à Stéphane Henriot, Directeur de la TAE (Techniques d'Applications Énergétiques) et Antonio Pires da Cruz, chef du département R102 (Modélisation et Simulation Système) pour m'avoir accueilli dans leur équipe et pour m'avoir fait confiance à la suite de ma thèse. Je me suis senti tout de suite très à l'aise dans leur équipe, que je tiens à saluer. J'ai travaillé durant ces trois années avec des personnes très compétentes et très motivées. Je salue en particulier Stéphane Richard, Jörg Anderlohr et Jean-Baptiste Michel pour les discussions scientifiques, automobiles et politiques et leur très bonne humeur. Je salue également les thésardes et thésards de R102 comme Pauline, Guillaume, Damien, Alessio, Vahid, Yohan et les plus jeunes, pour leur joie de vivre et l'ambiance chaleureuse qu'ils ont su développer. Je souhaite bon courage à Aymeric qui a repris le flambeau de l'injection LES et qui va bientôt terminer son dur labeur. Je voudrais remercier également mes collègues de bureau Olivier, Pierre et Romain. Il me semble impossible de remercier ici toutes les personnes avec lesquelles j'ai travaillé de près ou de loin. Qu'elles trouvent ici l'expression de toute ma gratitude.

Je voudrais également remercier l'équipe du CERFACS à Toulouse qui a participé à l'évolution du code de calcul et de la partie diphasique. Je remercie particulièrement Marlène, Nicolas, Olivier et Gabriel pour leur aide et leur disponibilité.

Enfin, je remercie de tout mon coeur ma famille et en particulier ma femme pour son soutien sans faille et sa compréhension pour mes nombreuses heures de travail tardives. Elle a su me redonner de la force quand il m'en manquait.



---

# **Simulation aux grandes échelles de l'injection de carburant liquide dans les moteurs à combustion interne**

## **Résumé**

Les objectifs ambitieux, fixés aux acteurs du secteur automobile par les pouvoirs publics, en matière d'émission de polluants et de gaz à effet de serre rendent aujourd'hui indispensable une compréhension plus fine de la combustion dans les moteurs. La simulation 3D aux grandes échelles (LES) représente une voie prometteuse pour répondre à ces enjeux. Elle permet l'étude de phénomènes transitoires complexes inaccessibles avec des moyens expérimentaux ou des méthodes de calcul traditionnelles de type RANS. Ce travail de thèse est une première étape vers la simulation LES de l'injection de carburant liquide dans les moteurs à piston. Il a consisté à adapter le code de calcul aux particularités physiques de l'injection directe, technologie qui se généralise actuellement à tous les types de moteurs à piston. Dans un premier temps, et afin de s'affranchir du calcul 3D complexe en sortie d'injecteur, une méthodologie originale, consistant à initier le calcul en aval de l'injecteur, est proposée et validée sur différents cas. Pour la simulation 3D, l'approche Eulérienne mésoscopique, à laquelle est ajouté un modèle d'interaction particules-particules, est utilisée pour simuler le spray. Les simulations ont été validées par comparaison expérimentale dans des conditions proches de l'injection Diesel. De plus, une étude sur la dynamique du spray a permis de mieux comprendre son évolution et de dégager des points communs avec un jet de gaz turbulent. Des simulations complémentaires ont également montré la prédictivité de la LES sur des injections Diesel réalistes. Enfin, un premier calcul moteur à injection directe a été réalisé et a permis de valider les développements réalisés dans le cadre de cette thèse.

## **Mots clés**

Simulation aux grandes échelles, écoulements diphasiques, modélisation Eulérienne mésoscopique, Injection, Diesel, Spray

# **Large Eddy Simulation of the liquid fuel injection in internal combustion engines**

## **Abstract**

Car manufacturers are facing increasingly severe regulations on pollutant emissions and fuel consumption. To respect these regulations, a better understanding of combustion processes is needed. Large Eddy Simulation (LES) is becoming a promising tool for such issues as it allows the study of complex unsteady phenomena which can not be analysed with RANS simulations or experiments.

The present work is a step towards the LES of liquid injection in piston engines. The numerical code has been adapted to the specifications of Direct Injection which is more and more used in industry.

Firstly, in order to avoid the difficulties linked to the 3D simulation of cavitation, primary break-up and turbulence in the near-nozzle region, an original methodology, based on an injector model, has been proposed. The idea is to initiate the spray physics downstream to the injector exit.

Then LES 3D simulations of spray have been conducted using the Eulerian Mesoscopic approach extended to dense dispersed sprays by the addition of a particle-particle interactions model. The simulation results have been validated by comparison with experimental data in Diesel conditions with a low injection pressure. Furthermore a study on the spray dynamics has permitted to better understand its development and to find similarities with a turbulent gaseous jet. Additional simulations on realistic Diesel injection conditions have shown the good predictivity of LES in such cases. Finally, a first simulation of a Direct Injection Engine has been carried out to assess the developments achieved in this work.

## **Keywords**

Large Eddy Simulation, Two-Phase Flow, Mesoscopic Eulerian Formalism, Injection, Diesel, Spray

# Table des matières

<b>Nomenclature</b>	<b>1</b>
<b>Introduction</b>	<b>7</b>
<b>I Modélisation bi-fluide</b>	<b>19</b>
<b>1 Approche volumique</b>	<b>23</b>
1.1 Définitions . . . . .	23
1.2 Méthode de dérivation . . . . .	26
1.3 Équation de continuité . . . . .	26
1.4 Équation de quantité de mouvement . . . . .	27
1.5 Équation de conservation des espèces . . . . .	29
1.6 Équation de l'enthalpie sensible . . . . .	30
1.7 Équation de l'énergie totale . . . . .	33
1.8 Conservation de l'énergie du système . . . . .	34
1.9 Bilan des équations par approche volumique . . . . .	36
<b>2 Approche statistique</b>	<b>37</b>
2.1 Définitions . . . . .	38
2.2 Formalisme mésoscopique . . . . .	42
2.3 Les équations de la phase dispersée . . . . .	43
2.3.1 Équations 'standard' simplifiées d'AVBP . . . . .	44
2.3.2 Équations 'standards' filtrées . . . . .	44
2.4 Modélisation 'standard' utilisée pour la phase dispersée . . . . .	46
2.4.1 Modélisation des termes décorrélés . . . . .	46

## TABLE DES MATIÈRES

---

2.4.2	Modélisation des termes de sous-maille . . . . .	46
2.4.3	Modélisation des termes d'échanges . . . . .	47
	Transfert massique . . . . .	48
	Échange de chaleur . . . . .	49
	Coefficient de transport : la règle des 2/3 . . . . .	50
	Traitement numérique de l'ébullition . . . . .	50
	Valeur de référence pour l'enthalpie liquide . . . . .	51
2.5	Quelques points d'interrogation sur l'approche mésoscopique . . . . .	51
2.5.1	Validité du conditionnement sur la réalisation gazeuse . . . . .	51
2.5.2	Notion d'échelle et remise en cause de l'hypothèse de viscosité . . . . .	51
2.5.3	Remarque sur le sens de l'opérateur statistique . . . . .	52
2.6	Equations du gaz filtrées . . . . .	52
2.7	Bilan des équations par approche statistique . . . . .	54
<b>3</b>	<b>Conclusions sur les équations diphasiques bi-fluides</b>	<b>55</b>
<b>II</b>	<b>Développements de AVBP pour le calcul de l'injection directe</b>	<b>57</b>
<b>4</b>	<b>Modélisation physique des écoulements diphasiques denses</b>	<b>61</b>
4.1	Classification des régimes diphasiques . . . . .	61
4.2	Importance des collisions . . . . .	62
4.3	Prise en compte des collisions . . . . .	64
4.4	Modélisation des termes collisionnels . . . . .	65
4.4.1	Taux de variation collisionnel . . . . .	65
4.4.2	Collisions binaires . . . . .	65
4.4.3	Fonction de distribution paire . . . . .	66
4.4.4	Développement de Grad . . . . .	66
4.4.5	Théorie linéaire . . . . .	68
4.5	Nouvelles équations bi-fluide pour les écoulements chargés . . . . .	69
4.5.1	Modélisation de la contribution cinétique . . . . .	70
4.5.2	Modélisation de la contribution collisionnelle . . . . .	70
4.5.3	Équation de quantité de mouvement . . . . .	72
4.5.4	Équation de conservation de RUE . . . . .	72



## TABLE DES MATIÈRES

---

4.6	Influence des termes collisionnels . . . . .	74
4.7	Quelques réflexions sur le modèle de collisions . . . . .	77
4.8	Quelques réflexions sur les équations du gaz . . . . .	78
4.8.1	Différence entre écoulement 'dilué' et 'dense' . . . . .	78
	Équations en écoulement dilué . . . . .	78
	Équations en écoulement dense . . . . .	79
4.8.2	Analyse du terme correctif . . . . .	79
<b>5</b>	<b>Aspects numériques</b>	<b>81</b>
5.1	Le code AVBP . . . . .	81
5.2	Mouvement de maillage . . . . .	83
5.3	Opérateur de diffusion . . . . .	85
5.4	Viscosité artificielle pour la phase liquide . . . . .	87
5.4.1	Problématique des équations bi-fluides . . . . .	87
5.4.2	Comment et où appliquer la viscosité artificielle ? . . . . .	87
5.4.3	Les différents senseurs de la phase liquide dans AVBP . . . . .	88
	Le senseur "Jameson-Riber" . . . . .	89
	Le senseur de "Colin" . . . . .	90
	Le senseur de "Colin-Martinez" . . . . .	91
	Exemple de résultat obtenu avec le nouveau senseur . . . . .	92
5.5	Conclusion . . . . .	93
<b>6</b>	<b>Condition limite d'injection pour la simulation 3D de spray Diesel. Méthodologie et validation</b>	<b>97</b>
6.1	Introduction . . . . .	97
6.2	FUEL 2009 - A model for the injection boundary conditions in the context of 3D Simulation of Diesel Spray : Methodology and Validation . . . . .	98
6.3	Complément . . . . .	109
<b>III</b>	<b>Validation</b>	<b>113</b>
6.4	Abstract . . . . .	115
6.5	Introduction . . . . .	115
6.6	Governing equations and modelling . . . . .	117

## TABLE DES MATIÈRES

---

6.6.1	Carrier phase . . . . .	117
6.6.2	Dispersed phase . . . . .	118
	Mesoscopic Eulerian formalism . . . . .	118
	Closure models for Random Uncorrelated Motion . . . . .	120
	Closure models for subgrid terms . . . . .	121
	Extension to dense sprays : collision effects . . . . .	121
	Characteristic time scales for sprays and Stokes number . . . . .	124
6.7	Numerical Simulation . . . . .	124
6.7.1	LES solver . . . . .	124
6.7.2	Experimental set-up . . . . .	124
6.7.3	Parameters of the simulation and boundary conditions . . . . .	125
6.7.4	Turbulent boundary conditions . . . . .	126
6.8	Results and analysis of the spray behaviour . . . . .	128
6.8.1	Effect of drag . . . . .	128
6.8.2	Effect of the turbulence intensity . . . . .	130
6.8.3	Effect of the chamber pressure . . . . .	130
6.8.4	Self-similarity . . . . .	133
6.8.5	Droplet distribution . . . . .	137
6.8.6	Uncorrelated droplet velocity . . . . .	137
6.9	Concluding remarks . . . . .	140
<b>IV</b>	<b>Vers la simulation du moteur à injection directe</b>	<b>143</b>
<b>7</b>	<b>Calculs en chambre pressurisée</b>	<b>147</b>
7.1	Expérience . . . . .	147
7.1.1	Dispositif expérimental . . . . .	147
7.1.2	Cas sans évaporation . . . . .	147
7.1.3	Cas avec évaporation . . . . .	148
7.2	Présentation du calcul 3D . . . . .	149
7.2.1	Géométrie et maillage . . . . .	149
7.2.2	Paramètres numériques . . . . .	155
7.2.3	Condition limite . . . . .	155

## TABLE DES MATIÈRES

---

7.3	Longueur de pénétration . . . . .	159
7.3.1	Commentaires sur l'analyse des longueurs de pénétration . . . . .	159
7.3.2	Cas non évaporants . . . . .	160
7.3.3	Cas avec évaporation . . . . .	163
7.3.4	Influence du maillage . . . . .	165
7.3.5	Conclusions sur l'analyse des longueurs de pénétration . . . . .	166
7.4	Angles de spray . . . . .	166
7.5	Analyse de l'évolution instationnaire du spray . . . . .	170
7.5.1	Etude des instabilités du spray non-évaporant T4P8 . . . . .	170
7.5.2	Étude des trajectoires des gouttes dans le spray non-évaporant T4P8 . . . . .	175
7.5.3	Étude du spray évaporant . . . . .	176
7.6	Conclusion sur les calculs en chambre pressurisée . . . . .	178
<b>8</b>	<b>Calcul d'un moteur à injection directe</b>	<b>179</b>
8.1	Choix de la configuration étudiée . . . . .	179
8.2	Paramètres du calcul 3D . . . . .	181
8.2.1	Moteur et point de fonctionnement étudié . . . . .	181
8.2.2	Maillage . . . . .	181
8.2.3	Conditions initiale et aux limites . . . . .	186
	Condition initiale . . . . .	186
	Conditions limites . . . . .	186
8.2.4	Modélisation de la combustion et de l'allumage . . . . .	187
8.3	Résultats de simulation 3D . . . . .	188
8.3.1	Mise en oeuvre de la méthodologie de calcul de l'injection directe . . . . .	188
8.3.2	Admission . . . . .	188
8.3.3	Injection . . . . .	189
8.3.4	Compression . . . . .	193
8.3.5	Combustion stratifiée . . . . .	196
8.4	Conclusion . . . . .	203
	<b>Conclusion</b>	<b>205</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>222</b>

---

TABLE DES MATIÈRES

---

<b>ANNEXES</b>	<b>223</b>
<b>A Le code de calcul AVBP</b>	<b>225</b>
A.1 Equations de base . . . . .	225
A.1.1 Equations de Navier-Stokes . . . . .	225
A.1.2 Loi d'état . . . . .	227
A.1.3 Tabulation des grandeurs thermodynamiques . . . . .	227
A.2 Discrétisation des équations . . . . .	228
A.2.1 Intégration temporelle . . . . .	228
A.2.2 Intégration spatiale . . . . .	229
Volumes de contrôle . . . . .	229
Méthode cell-vertex . . . . .	230
Schéma de Lax-Wendroff volumes finis . . . . .	230
Schéma TTGC éléments finis . . . . .	232
A.3 Modèles LES . . . . .	232
A.3.1 Modèles de turbulence . . . . .	232

# Table des figures

1	Combustion Diesel et vues de l'injection directe dans la chambre de combustion. Source : <i>auto-innovations.com</i> . . . . .	10
2	Physique du spray en sortie d'injecteur . . . . .	11
1.1	Volume fermé d'intégration . . . . .	35
2.1	Principe de l'approche statistique . . . . .	37
2.2	Présentation de la vitesse mésoscopique (ou vitesse moyenne ou corrélée) et de la vitesse décorrélée en comparaison avec la vitesse particulière . . . . .	42
2.3	Goutte isolée à la température $T_\zeta$ s'évaporant dans un écoulement de gaz à la température $T_\infty$ et avec une fraction massique de carburant $Y_{F,\infty}$ . . . . .	47
4.1	Classification des régimes d'écoulements diphasiques selon Elghobashi (1994) . . . . .	61
4.2	Rapport des temps caractéristiques de collision et de relaxation . . . . .	63
4.3	Principe du transfert d'énergie pour la phase liquide . . . . .	73
4.4	Cas de production d'énergie décorrélée par compression . . . . .	74
4.5	Evolution de $P_{ratio}$ en fonction de la fraction volumique de liquide pour différentes valeurs du paramètre $\alpha_m$ . . . . .	75
4.6	Evolution de $P_{ratio}$ en fonction de la fraction volumique de liquide pour différentes valeurs du paramètre $\alpha_m$ . Zone dense . . . . .	75
4.7	Évolution de $v_{ratio}$ en fonction de la fraction volumique de liquide pour différentes valeurs d'énergie RUE. . . . .	76
4.8	Évolution de $\kappa_{ratio}$ en fonction de la fraction volumique de liquide pour différentes valeurs d'énergie RUE. . . . .	76
4.9	Mécanismes visqueux par contribution cinétique dans la théorie cinétique des gaz. . . . .	76
4.10	Régime de collision en fonction du facteur d'impact B et du nombre de Weber $W_e$ d'après Qian and Law (1997). . . . .	77

TABLE DES FIGURES

---

4.11 Régime de collision en fonction du facteur d'impact $B$ et du nombre de Weber $W_e$ d'après Qian and Law (1997). Données numériques. . . . .	77
5.1 Principe de la méthode cell-vertex, en deux étapes : assemblage et distribution. D'après Moureau (2004). . . . .	82
5.2 Spectres d'énergie typiques obtenus en DNS de turbulence homogène isotrope avec l'opérateur de diffusion "4 $\Delta$ ". D'après le Handbook AVBP . . . . .	86
5.3 Comparaison des champs des senseurs 'Jameson-Riber' en haut et 'Colin-Martinez' en bas sur une injection Diesel . . . . .	93
6.1 Présentation du cône sur lequel est appliquée DITurBC . . . . .	109
6.2 Cross section of the mesh and view of the cone dedicated to the DITurBC. . . . .	125
6.3 Decrease of mean axial velocity and effects of the inlet gas velocity. . . . .	128
6.4 Radial distribution at $X/D = 100$ of mean and rms axial velocity. Comparison on the effect of the drag force. . . . .	129
6.5 Evolution of spray volume and energy exchange between phases with time. . . . .	130
6.6 Instantaneous iso-surface of the liquid volume fraction (left) and the gas vorticity magnitude (right) for different levels of turbulence at $t = 2ms$ . . . . .	131
6.7 Decrease of mean axial velocity and effects of the level of turbulence. . . . .	132
6.8 Radial distribution at $X/D = 100$ of mean and rms axial velocity. Comparison on the effect of the level of turbulence. . . . .	132
6.9 Instantaneous iso-surface of the liquid volume fraction (left) and the gas vorticity magnitude (right) for different back pressures at $t = 2ms$ . . . . .	133
6.10 Decrease of mean axial velocity and effects of the boundary condition parameters. . . . .	134
6.11 Evolution of the turbulence intensity along axis for liquid and gas phase. . . . .	135
6.12 Self-similarity of the mean liquid axial velocity. Comparison with the experiment of Hussein et al. (1994). . . . .	136
6.13 Coefficient of the cross correlation $C_{uv}$ for the gas and liquid phase at $X/D=100$ . Comparison with the experiments of Wygnansky and Fielder (1969), Gibson (1963) and Panchapakesan and Lumley (1993) . . . . .	136
6.14 Cross section view. Instantaneous liquid volume fraction field and gas velocity vectors. . . . .	137
6.15 Partitioning of the particle fluctuating motion along axis. Comparison with the correlation of Vance et al. (2006). . . . .	139
6.16 Decomposition of the particle fluctuating motion at 100D. Radial profiles are normalised by the mean correlated energy on spray axis. . . . .	139

TABLE DES FIGURES

---

7.1	Schéma de la cellule d'après (Verhoeven et al. 1998) . . . . .	148
7.2	Géométrie du nez mono-trou en millimètres d'après (Verhoeven et al. 1998) . . . . .	148
7.3	Vues globales de présentation du maillage . . . . .	150
7.4	Vue en coupe du maillage (plan de coupe cf. 7.3). . . . .	150
7.5	Vue en coupe du maillage (plan de coupe cf. 7.3). Zoom sur la zone d'injection. . . . .	150
7.6	Vues en coupe des différents maillages . . . . .	151
7.7	Vues en coupe de la zone d'injection pour les différents maillages . . . . .	152
7.8	Vues en coupe de la zone de développement du spray pour les différents maillages . . . . .	153
7.9	Cône de décalage de la condition limite . . . . .	155
7.10	Taux d'introduction expérimental (Vanhemelryck 1996) . . . . .	157
7.11	Taux d'introduction simulé . . . . .	157
7.12	Comparaison des levées d'aiguille en fonction de la pression d'injection (Vanhemelryck 1996) . . . . .	158
7.13	Comparaison des longueurs de pénétration pour le cas T4P4. Influence de la pente du taux d'introduction. . . . .	160
7.14	Comparaison des longueurs de pénétration pour le cas T4P8. Influence de la pente du taux d'introduction. . . . .	161
7.15	Comparaison des longueurs de pénétration pour le cas T4P15. Influence de la pente du taux d'introduction. . . . .	161
7.16	Comparaison des longueurs de pénétration pour le cas T4P4 et deux valeurs de diamètre	162
7.17	Comparaison des longueurs de pénétration pour le cas T8P4. Pente 0.2ms . . . . .	163
7.18	Comparaison des longueurs de pénétration pour le cas T8P4. Pente 0.1ms . . . . .	164
7.19	Comparaison des longueurs de pénétration pour le cas T8P4. Diamètre divisé par 2 . . . . .	164
7.20	Comparaison des longueurs de pénétration pour la cas T4P4. Influence du maillage. . . . .	166
7.21	Comparaison des visualisations du spray T4P8 par iso-surface de diamètre $d = 3\mu m$ . . . . .	168
7.22	Comparaison des visualisations du spray T4P8 par iso-surface de fraction volumique de liquide $\alpha_l = 0.007$ . . . . .	169
7.23	Évolution temporelle de l'iso-surface de pression à 10% du minimum. Début de l'injection.	171
7.24	Évolution temporelle de l'iso-surface de pression à 10% du minimum. Visualisation de l'appariement et de l'étirement tourbillonnaire . . . . .	173
7.25	Évolution temporelle de l'iso-surface de critère $Q$ avec $Q = 3,5.10^8$ . Visualisation de l'appariement et de l'étirement tourbillonnaire . . . . .	174

TABLE DES FIGURES

---

7.26	Trajectoires des gouttelettes coloriées par la vitesse . . . . .	175
7.27	Trajectoires des gouttelettes coloriées par la vitesse. Changement de perspective . . . . .	176
7.28	Distribution de fraction massique de n-dodécane. Iso-contours de fraction massique pour $Y_{Fuel} = 0.01$ , $Y_{Fuel} = 0.1$ et $Y_{Fuel} = 0.2$ . . . . .	177
8.1	Vues de la géométrie du XU10J4 . . . . .	180
8.2	Vue de la zone d'injection . . . . .	180
8.3	Principe de la gestion de maillage en configuration moteur d'après (Richard 2005) . . . . .	182
8.4	Adaptation d'un calcul injection indirecte à l'injection directe. Les encadrés rouges concernent les phases de calcul monophasiques. Les encadrés bleus concernent les phases de calcul diphasiques . . . . .	183
8.5	Vue du maillage . . . . .	184
8.6	Vues de l'intérieur de la chambre de combustion et de la zone d'injection . . . . .	184
8.7	Vue globale du maillage . . . . .	185
8.8	Vue 3D et plans de coupe . . . . .	185
8.9	Vue des plans en coupe du maillage . . . . .	186
8.10	Champ de vitesse du gaz (gauche) et structures turbulentes (droite) pendant la phase d'admission. Angle de $-205,5^\circ V$ . . . . .	189
8.11	Iso-surface de fraction volumique de liquide (fixée à 0,003) colorée par le diamètre des gouttes (gauche) et iso-surface de fraction massique de carburant (fixée à 0,4) colorée par la vortacité du gaz (droite). Angle de $-290^\circ V$ . . . . .	190
8.12	Iso-surface de fraction volumique de liquide (fixée à 0,003) colorée par le diamètre des gouttes (gauche) et iso-surface de fraction massique de carburant (fixée à 0,4) colorée par la vortacité du gaz (droite). Angle de $-192,5^\circ V$ . . . . .	191
8.13	Iso-surface de fraction volumique de liquide (fixée à 0,003) colorée par le diamètre des gouttes (gauche) et iso-surface de fraction massique de carburant (fixée à 0,4) colorée par la vortacité du gaz (droite). Angle de $-185^\circ V$ . . . . .	192
8.14	Champ de fraction massique de carburant (gauche) et iso-surface de fraction massique de carburant (fixée à 0,4) colorée par la vortacité du gaz (droite). Angle de $-175^\circ V$ . . . . .	194
8.15	Champ de fraction massique de carburant (gauche) et iso-surface de fraction massique de carburant (fixée à 0,4) colorée par la vortacité du gaz (droite). Angle de $-160^\circ V$ . . . . .	195
8.16	Champ de fraction massique de carburant (gauche) et iso-surface de fraction massique de carburant (fixée à 0,4) colorée par la vortacité du gaz (droite). Angle de $-120^\circ V$ . . . . .	195



TABLE DES FIGURES

---

8.17	Champ de fraction massique de carburant par coupe dans l'axe cylindre (gauche) et champ de la fraction massique de carburant par coupe perpendiculaire à l'axe cylindre (droite). Angle de $-50^\circ\text{V}$ . . . . .	196
8.18	Iso-surface d'avancement à 0,3 colorée par la richesse (gauche) et champ en coupe de la fraction massique de CO (droite). Angle de $11^\circ\text{V}$ . . . . .	196
8.19	Vue en coupe parallèle au piston, dans la chambre de combustion, des champs de richesse, de densité de surface de flamme $\Sigma$ , de fraction massique de CO et d'avancement $c$ . Angle de $1^\circ\text{V}$ . . . . .	198
8.20	Vue en coupe parallèle au piston, dans la chambre de combustion, des champs de richesse, de densité de surface de flamme $\Sigma$ , de fraction massique de CO et d'avancement $c$ . Angle de $7^\circ\text{V}$ . . . . .	199
8.21	Vue en coupe parallèle au piston, dans la chambre de combustion, des champs de richesse, de densité de surface de flamme $\Sigma$ , de fraction massique de CO et d'avancement $c$ . Angle de $11^\circ\text{V}$ . . . . .	200
8.22	Vue en coupe parallèle au piston, dans la chambre de combustion, des champs de richesse, de densité de surface de flamme $\Sigma$ , de fraction massique de CO et d'avancement $c$ . Angle de $17^\circ\text{V}$ . . . . .	201
8.23	Vue en coupe parallèle au piston, dans la chambre de combustion, des champs de richesse, de densité de surface de flamme $\Sigma$ , de fraction massique de CO et d'avancement $c$ . Angle de $25^\circ\text{V}$ . . . . .	202
A.1	Notations pour la méthode de discrétisation cell-vertex . . . . .	229
A.2	Principe de la méthode cell-vertex. Elle se déroule en deux étapes : assemblage et distribution. . . . .	230

## TABLE DES FIGURES

---

# Liste des tableaux

6.1	Numerical parameters of the LES calculations. . . . .	125
6.2	Boundary conditions for the reference case. . . . .	126
6.3	Physical parameters of the simulation for the reference case. . . . .	126
7.1	Présentation des cas sans évaporation en chambre pressurisée . . . . .	148
7.2	Présentation du cas avec évaporation en chambre pressurisée . . . . .	149
7.3	Composition initiale dans la chambre pour le cas T8P4 . . . . .	149
7.4	Paramètres du maillage de référence . . . . .	154
7.5	Paramètres du maillage fin . . . . .	154
7.6	Paramètres du maillage grossier . . . . .	154
7.7	Paramètres du calcul dans le cas T4P4 . . . . .	155
7.8	Conditions aux limites . . . . .	156
7.9	Valeur des pentes des taux d'introduction en fonction de la pression d'injection . . . . .	158
8.1	Paramètres géométriques du moteur et point de fonctionnement étudié. Les angles vile- brequin sont relatifs au point mort haut (PMH) combustion. . . . .	181
8.2	Dimensions du maillage et temps de calcul associés . . . . .	183
8.3	Conditions aux limites adoptées pour les simulations. . . . .	187



# Nomenclature

## Abréviations

DiTurBC Downstream Inflow Turbulent Boundary Condition

DNS Direct Numerical Simulation

FDP Fonction Densité de Probabilité

LES Large Eddy Simulation

NSCBC Navier Stokes Characteristic Boundary Condition

PDF Probability Density Function

PMB Point Mort Bas

PMH Point Mort Haut

RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes

RMS Root Mean Square

RUE Random Uncorrelated Energy

RUM Random Uncorrelated Motion

RUV Random Uncorrelated Velocity

SGS Subgrid Scale

THI Turbulence Homogène Isotrope

## Exposants

' Fluctuation par rapport à la moyenne de Reynolds

" Fluctuation par rapport à la moyenne de Favre

\* Partie déviatrice

! Terme de sous-maille

## LISTE DES TABLEAUX

---

$c$	Terme cinématique
$coll$	Terme collisionnel
$tot$	Terme total (cinématique+collisionnel)
<b>Lettres grecques</b>	
$\alpha_k$	Fraction volumique de la phase $k$
$\alpha_m$	Fraction volumique maximum
$\chi_k$	Fonction indicatrice de la phase $k$
$\delta\theta$	Énergie décorrélée
$\delta K_{l,ijk}$	Tenseur des corrélations triples du mouvement non corrélé
$\delta q_l^2$	Énergie décorrélée moyenne des particules
$\delta R_{l,ij}$	Tenseur des corrélations doubles du mouvement non corrélé
$\delta u_{p,i}^k$	Composante décorrélée de la vitesse de la particule $k$
$\Delta_f$	Taille caractéristique du filtre
$\delta_I$	Distribution de Dirac associée à l'interface
$\delta_{ij}$	Symbole de Kronecker
$\Gamma_k$	Terme de transferts interfaciaux de masse pour la phase $k$
$\iota$	Invariant élémentaire de collision
$\kappa_{l,RUV}$	Coefficient de diffusion du mouvement décorrélé
$\Lambda_l$	Terme d'échange d'enthalpie sensible par évaporation
$\mu$	Viscosité dynamique
$\nu$	Viscosité cinématique
$\nu_{l,RUV}$	Viscosité du mouvement décorrélé
$\Omega_j$	Cellule de calcul $j$
$\Phi_l$	Terme d'échange thermique à l'interface par conduction
$\Pi_{\delta\theta_l}$	Production de sous maille de mouvement décorrélé
$\Pi_k$	Terme de transfert d'énergie pour la phase $k$
$\rho$	Masse volumique
$\Sigma$	Densité de surface de flamme

## LISTE DES TABLEAUX

---

$\sigma_{i,j}$	Composante $(i,j)$ du tenseur des contraintes de la phase gazeuse
$\Sigma_{l,i,j}$	Composante $(i,j)$ du tenseur des contraintes de la phase liquide
$\tau_c$	Temps caractéristique de collision
$\tau_{i,j}$	Composante $(i,j)$ du tenseur des contraintes visqueuses
$\tau_p$	Temps de relaxation des particules
$\tau_t$	Temps turbulent relatif à l'échelle intégrale
$\xi$	Bulk viscosity
$G_{\Delta_f}$	Noyau du filtre spatial

### Lettres latines

$B_M$	Nombre de Spalding
$\dot{m}_p$	Variation temporelle de masse de la particule
$\mathbb{C}$	Contribution collisionnelle
$\mathcal{H}_f$	Réalisation de la phase fluide ou gazeuse
$\tilde{q}_l^2$	Énergie cinétique mésoscopique
$C_D$	Coefficient de traînée
$C_l$	Constante du modèle de sous-maille de la phase liquide
$c_p$	Vecteur vitesse de la particule dans l'espace des phases
$C_s$	Constante du modèle de sous-maille de la phase liquide
$D$	Diamètre de sortie de l'injecteur
$d$	Diamètre des gouttes
$D_\phi$	Coefficient de diffusion de l'espèce $\phi$
$d_p$	Diamètre des gouttes
$e$	Coefficient d'inélasticité
$e_t$	Énergie totale non chimique, somme de l'énergie cinétique et de l'énergie sensible
$f$	Fonction de densité de probabilité
$f^2$	Fonction de distribution paire
$F_D$	Force de traînée
$F_{ext_k}$	Force extérieure appliquée à la phase $k$

## LISTE DES TABLEAUX

---

$g_0$	Fonction de distribution radiale
$h$	Enthalpie
$H^n$	n-ième polynôme d'Hermite
$K_n$	Nombre de Knudsen
$l_\delta$	Libre parcours moyen
$l_m$	Plus petite échelle du champ de vitesse mésoscopique
$m_p$	Masse de la particule
$n_l$	Densité en nombre de particules
$n_{k,j}$	Normale sortante de la phase $k$ projetée sur l'axe normalisé de direction $j$
$p$	Pression
$q_j$	Projection sur l'axe $j$ du flux moléculaire de chaleur
$Q_{l,j}$	Terme de diffusion de sous maille de mouvement décorrélé
$Re$	Nombre de Reynolds
$Re_d$	Nombre de Reynolds particulaire
$S_t^t$	Nombre de Stokes basé sur un temps turbulent
$S_i$	Surface de la goutte projetée sur le plan perpendiculaire à l'axe $i$
$S_{k,ij}$	Tenseur de déformation du champ de vitesse de la phase $k$
$S_t$	Nombre de Stokes
$Sc_F$	Nombre de Schmidt du carburant
$Sh$	Nombre de Sherwood
$T$	Température
$T_{eb}$	Température d'ébullition
$T_{l,ij}$	Tenseur de sous-maille pour la phase liquide
$u_i$	Vitesse projetée sur l'axe $i$
$u_{p,i}^{(k)}(t)$	Vitesse Lagrangienne de la particule $k$ à l'instant $t$
$v_{D,\phi,j}$	Vitesse de diffusion de l'espèce $\phi$
$V_j$	Vitesse de l'interface projetée sur l'axe $j$
$x_i$	Coordonnées d'un point dans l'espace



## LISTE DES TABLEAUX

---

$y_\phi$  Fraction massique de l'espèce  $\phi$

### Opérateurs

$\langle . \rangle_l$  Moyenne statistique pour la phase liquide

$\bar{\cdot}$  Moyenne de Reynolds

$\check{\cdot}$  Quantité mésoscopique

$\hat{\cdot}$  Moyenne de Favre pour la phase liquide

$\tilde{\cdot}$  Moyenne de Favre pour la phase gazeuse

$F_k$  Quantité relative à la phase  $k$  et moyennée au sens du volume

### Indices

$F$  Carburant vaporisé (Fuel)

$g$  Phase porteuse ou phase gazeuse

$I$  Interface gaz-liquide

$k$  Phase  $k$

$l$  Phase liquide ou dispersée

$v$  Carburant vaporisé

SGS Terme de sous-maille



# Introduction

## Contexte industriel

Les constructeurs automobiles sont actuellement confrontés à diverses difficultés. L'utilisation intensive d'énergie fossile, notamment par les transports, a entraîné une raréfaction des ressources. Ces ressources, non renouvelables et en quantité limitée, verront leur prix augmenter si les modes de consommation restent identiques. En plus de la raréfaction des ressources, l'utilisation des énergies fossiles conduit par les processus de combustion à l'émissions de gaz polluants et de particules. Les autorités limitent ces émissions par des normes de plus en plus drastiques (par exemple Euro6 en 2014) ainsi que par des procédés de bonus/malus auxquels les constructeurs doivent s'adapter. Enfin, l'émergence d'une conscience écologique citoyenne les encourage à s'adapter à leur clientèle.

Ce type d'énergie présente l'énorme avantage d'être facilement transportable, en toute sécurité, et possède un haut niveau de dégagement d'énergie pour un volume d'encombrement et une masse faibles. Ainsi les moteurs à combustion ont encore un bel avenir même si l'arrivée prochaine et massive de moteurs électriques dans le parc automobile ne fait aucun doute. Les avantages des moteurs à combustion devraient être combinés aux avantages des moteurs électriques pour satisfaire, dans un premier temps, les contraintes écologiques et technologiques. La recherche sur la diminution des émissions de polluants et de la consommation des moteurs à combustion interne reste donc d'actualité.

Abaisser la consommation est donc devenu un enjeu industriel et commercial. Cet exercice se révèle toutefois très délicat puisque, alourdis par des systèmes électroniques embarqués et des dispositifs de confort et de sécurité de plus en plus nombreux, les véhicules actuels requièrent une énergie croissante pour avancer. De plus, les normes étant de plus en plus strictes, les temps de développement ainsi que les coûts associés de plus en plus faibles, on se rapproche d'une consommation physique minimale et le gain possible en consommation s'amenuise.

L'injection directe, qui consiste à injecter le carburant liquide directement dans la chambre de combustion, entre dans le cadre des technologies primordiales et largement utilisées, en Diesel et maintenant en essence. Elle permet de diminuer consommation et polluants et représente donc un axe de recherche important. De nouvelles stratégies de combustion émergent comme celles de type CAI<sup>TM</sup> pour Controlled Auto Ignition (Duret and Lavy 2000; Jeuland et al. ; Knop et al. ) pour les moteurs essence et HCCI pour

Homogeneous Charge Compression Ignition (Ryan and Callahan 1996; Lu et al. 2005) pour les moteurs Diesel. Ces stratégies représentent des voies prometteuses. Elles nécessitent néanmoins un bon contrôle et une bonne répétabilité de la combustion, ce qui est un exercice délicat.

Le seul moyen d'abaisser la consommation et d'éviter la formation de polluants est de comprendre précisément les mécanismes prépondérants qui influent sur la combustion. Les chercheurs disposent de différents moyens pour y arriver. Les essais expérimentaux permettent une analyse 'in situ' et s'avèrent dans la pratique indispensables. Néanmoins, le coût induit, en terme de temps et de matériels, limite leur utilisation. Un constructeur ne peut plus se permettre de réaliser d'innombrables essais, il n'en a plus le temps et il n'en a plus les moyens. La simulation numérique intervient ainsi comme moyen additionnel en tant qu'aide au design et à la conception. Son domaine d'application tend à s'étendre rapidement aux nouvelles technologies moteur.

La simulation numérique intervient ainsi comme un outil additionnel et prédictif. Plusieurs niveaux de simulation (0D, 1D et 3D) peuvent être utilisés par l'ingénieur suivant l'objectif recherché : dimensionnement, calibration ou compréhension.

## La simulation numérique tridimensionnelle

L'augmentation des capacités de calcul a permis à la simulation tri-dimensionnelle (3D) de démontrer son potentiel. Les efforts de recherche actuels se concentrent sur une amélioration de la prédictivité par une meilleure prise en compte de la physique calculée tout en ayant un temps de calcul exploitable au niveau industriel.

La simulation 3D en mécanique des fluides consiste à calculer sur des points de discrétisation de l'espace, les équations de la mécanique des fluides réactifs. Il est possible d'effectuer des calculs sur des géométries complexes en prenant en compte les réactions chimiques. Une bonne prédiction de la turbulence dans la chambre de combustion est nécessaire pour une bonne prédiction de la combustion, les deux étant intimement liées. La principale difficulté de la simulation numérique dans les moteurs à piston provient du couplage important entre divers phénomènes physiques. Ainsi la turbulence, le spray<sup>1</sup>, la combustion et l'acoustique sont intimement liés. De plus ces phénomènes physiques interviennent sur une large gamme d'échelles spatiales et temporelles. Ainsi, on peut citer quelques grandeurs caractéristiques intervenant dans les moteurs à pistons (Heywood 1988) :

- Alésage du cylindre : 6 à 10cm
- Échelle intégrale de la turbulence : 2 à 10mm
- Diamètre moyen des gouttes dans un spray :  $\approx 30\mu\text{m}$
- Échelle de Kolmogorov de la turbulence :  $\approx 10\mu\text{m}$

---

<sup>1</sup>dans ce manuscrit, nous utiliserons le terme anglais 'spray' pour désigner le nuage de gouttes produit par l'injecteur. Le terme anglais a été retenu car il est fortement utilisé dans le milieu des ingénieurs motoristes.

---

Cette large gamme d'échelles impose un maillage très important si l'on veut résoudre tous les phénomènes. Ce type de maillage étant inaccessible à l'heure actuelle, il est nécessaire de modéliser une partie des phénomènes. Divers niveaux de modélisation existent. Il existe trois types principaux de simulation pour les écoulements turbulents, qui sont par ordre croissant de prédictivité et de temps de calcul :

- La simulation **Reynolds Average Navier Stokes** (RANS) ([Launder and Spalding 1972](#)) dans laquelle on modélise toutes les échelles ou structures turbulentes. Les équations résolues sont obtenues par moyenne statistique des équations de Navier-Stokes. Cette approche est utilisée comme outil courant dans les applications moteur ([Drake and Haworth 2007](#)). Le problème de cette approche est qu'elle ne fournit que des informations portant sur un cycle moteur 'moyen' pour un point de fonctionnement donné et ne permet pas d'analyser ou d'aborder de manière approfondie les variations cycliques. Le principal intérêt est un temps de calcul faible comparé aux autres approches 3D, grâce notamment aux maillages 'grossiers' utilisés (maille de l'ordre du millimètre). Les codes de calcul sont généralement très robustes et demandent un effort numérique plus faible que pour des approches LES ou DNS.
- La simulation aux Grandes Échelles (LES pour **Large Eddy Simulation**) ([Sagaut 2005](#)) est une modélisation à statistique partielle où seuls les petits tourbillons sont traités statistiquement. Les grands tourbillons qui dépendent fortement de la géométrie sont résolus alors que les petites échelles, qui ont un caractère plus universel, sont modélisées. Ce type de simulation requiert une puissance de calcul supérieure aux méthodes RANS. Le temps de calcul plus long s'explique par un maillage plus fin (maille de l'ordre de la centaine de microns) et des schémas numériques d'ordre plus élevé. Aidée par des moyens de calculs croissants, la LES devient, à l'heure actuelle, une voie envisageable pour le calcul moteur. Elle permettra en outre de mieux analyser les variations cycles à cycles ([Ozidor et al. 1994](#)). On peut noter aussi une capacité à mieux décrire les rotations, les fortes anisotropies et redistributions, les taux de déformations importants contrairement aux modèles RANS à deux équations ([Chassaing 2000](#)). Toutes ces caractéristiques sont importantes dans les moteurs à piston notamment autour des soupapes, au niveau de l'impact de jet sur les parois ou pour les mouvements aérodynamiques de rotation de type Swirl ou Tumble.

La LES est très utilisée dans les moteurs aéronautiques ainsi que dans les turbines à gaz ([Roux et al. 2005](#); [Selle et al. 2006](#); [James et al. 2006](#); [Moin and Apte 2006](#); [Schmitt et al. 2007](#)) et se développe fortement dans le cas des moteurs à combustion interne ([Moureau et al. 2004](#); [Vermorel et al. 2007](#); [Richard et al. 2007](#)).

- La simulation Numérique Directe (DNS pour **Direct Numerical Simulation**) dans laquelle toutes les échelles de la turbulence sont résolues. Ce type de simulation n'est pas utilisé dans le domaine industriel. Elle nécessite un temps de calcul prohibitif, et n'est utilisée que sur de très petits domaines (de l'ordre ou inférieur au centimètre) pour aider au développement et à la validation de modèles.

La simulation globale des écoulements dans les moteurs à piston passe par la mise en place de la simulation de l'injection directe et ce d'autant plus que la compréhension des phénomènes physiques conduisant à un spray efficace en termes de combustion et de polluants est difficile. De plus, il existe

différentes stratégies d'injection qu'il est coûteux de reproduire de manière expérimentale. La simulation de l'injection directe représente donc un axe d'investigation majeur.

## Physique de l'injection directe Diesel

L'injection directe est une technique majeure largement utilisée sur les moteurs Diesel et maintenant sur les moteurs à allumage commandé. Elle consiste à mettre du carburant sous pression et à le libérer dans la chambre de combustion à l'aide de l'ouverture de l'aiguille ou de la soupape de l'injecteur. Son rôle principal est de propulser un nuage de fines gouttes dans la chambre de combustion. Les gouttes doivent être suffisamment fines et bien réparties pour que l'évaporation soit rapide et homogène. Le but final étant de limiter la consommation et les polluants.

Les injecteurs sur les moteurs Diesel sont dotés de plusieurs trous (Fig. 1) et produisent des sprays de type 'cônes pleins' alors que les injecteurs sur les moteurs à allumage commandé n'ont qu'une seule section de sortie et produisent un spray de type 'cône creux'.



(a) Vue éclatée de la chambre de combustion d'un moteur Diesel injection directe multi-trous



(b) Visualisation de la combustion dans un moteur Diesel injection directe multi-trous

FIG. 1 – Combustion Diesel et vues de l'injection directe dans la chambre de combustion. Source : *auto-innovations.com*

Les systèmes d'injection directe représentent un coût élevé sur un moteur. Ce coût s'explique par des limites technologiques sans cesse repoussées. Des ordres de grandeur sont présentés ci-dessous dans le cas d'une injection directe Diesel à rampe commune et permettent de mieux appréhender les conditions d'injection :

- Pression d'injection :  $\approx 150$  à  $200\text{MPa}$
- Pression dans la chambre au moment de l'injection :  $5$  à  $10\text{MPa}$
- Diamètre de sortie d'un injecteur :  $100$  à  $200\mu\text{m}$
- Diamètre moyen des gouttes dans un spray :  $\approx 30\mu\text{m}$
- Vitesse des 'gouttes' en sortie d'injecteur :  $400\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$  à  $600\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
- Durée d'injection :  $\approx 1 - 2\text{ms}$

La physique du spray est très complexe et fait intervenir une multitude de phénomènes physiques (Siri-gnano 1999). Selon la géométrie, des phénomènes de cavitation peuvent apparaître dans l'injecteur. La cavitation a une grande influence sur les caractéristiques du spray en sortie d'injecteur (Saliba et al. 2004) et indirectement, plus en aval, sur la formation du mélange (Blessing et al. 2003). D'après Baumgarten et al. (2001), son rôle principal est d'apporter de l'énergie dont une partie servira pour l'atomisation.

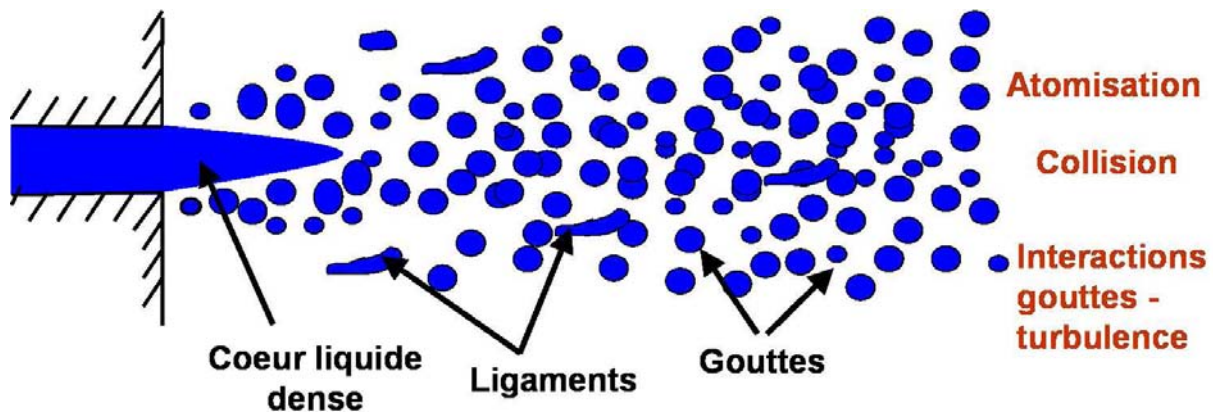


FIG. 2 – Physique du spray en sortie d'injecteur

Dans la chambre de combustion, selon la géométrie de l'injecteur, la vitesse de sortie du carburant et le milieu gazeux dans lequel on injecte, le jet de liquide s'atomise ( Fig. 2), se disperse, apporte de l'énergie cinétique turbulente au gaz et s'évapore. Différentes structures turbulentes se forment au sein du spray (Dan et al. 1997). Ces structures répartissent les gouttes dans l'espace selon leur diamètre et vont donc conditionner la distribution spatiale de vapeur. Deux types d'atomisation apparaissent. L'atomisation primaire consiste en l'éclatement du jet liquide en de nombreuses structures de grande échelle (ordre du diamètre du jet). Ce type d'atomisation se déroule en sortie d'injecteur. Une partie de la communauté scientifique considère actuellement que le jet liquide est complètement atomisé à une distance de quelques diamètres d'injecteur (Smallwood and Gulder 2000). Ce point de vue se base sur des mesures récentes par diagnostics laser (Gulder et al. 1992; Siebers 1998).

Le deuxième type d'atomisation est l'atomisation secondaire. Les gouttes les plus grosses se séparent en gouttes plus petites par interaction avec le gaz. Ce type d'atomisation peut se dérouler dans une zone proche de l'injecteur mais aussi dans le reste du spray. Une atomisation imparfaite peut entraîner une

dispersion non uniforme des gouttelettes créant des zones de concentration préférentielle de vapeur. Ceci a comme conséquence une mauvaise combustion.

Le spray ne s'évapore pas instantanément à la sortie de l'injecteur mais la longueur de pénétration du liquide, c'est-à-dire la distance maximale à laquelle on peut observer des gouttes, est constante pour une injection de longue durée. Au delà de cette distance, la vapeur de carburant se mélange avec l'air environnant. La vapeur étant produite à très haute vitesse, le mélange est fortement turbulent et possède de fortes similitudes avec le mélange dans un jet de gaz (Bruneaux 2002; Bruneaux 2005). Le mélange ainsi que le niveau d'énergie turbulente ont une influence d'ordre 1 sur la combustion et la formation de polluants.

### Simulation du spray

Simuler un spray dans un moteur à piston est un défi pour les chercheurs. D'une part, le spray évolue, comme nous l'avons vu, dans un milieu aux conditions hostiles, il est donc très difficile d'y effectuer des mesures expérimentales pour valider des modèles. D'autre part, les phénomènes physiques sont nombreux et interviennent sur une large gamme d'échelles spatiales. La simulation complète de l'injection, de la cavitation dans l'injecteur jusqu'à la combustion est donc difficilement réalisable.

La simulation de spray fait partie du domaine plus large de la simulation des écoulements diphasiques comprenant les suspensions, les écoulements avec bulles ou sédiment ainsi que les écoulements en milieu poreux. Dans ce manuscrit, on ne s'intéresse qu'au spray, c'est-à-dire qu'à l'écoulement multiphasique en sortie d'injecteur. Les deux seules phases considérées sont la phase liquide comprenant la colonne de liquide ainsi que les gouttes et la phase porteuse comprenant le gaz présent dans la chambre de combustion ainsi que le carburant évaporé. Le problème de la modélisation vient essentiellement de la prise en compte de l'interface et des échanges à l'interface. Ces interfaces sont des discontinuités de propriétés physiques. Elles peuvent être de forme complexes et évoluent au cours du temps. Leur nombre peut être également très important. Si l'on veut résoudre localement toutes ces interfaces et prévoir leur mouvement, le temps de calcul, pour un spray par exemple, est complètement prohibitif. Pour contourner ces difficultés, l'idée est donc d'observer l'évolution des deux phases de manière macroscopique sans s'attacher à détailler chaque inclusion. Une synthèse détaillée des modèles disponibles est fournie par (Crowe et al. 1996). Pour la simulation de spray, la phase porteuse (le gaz) est décrite par les équations de Navier-Stokes et le formalisme est Eulérien. Pour la phase liquide, les gouttes, ou les ligaments, peuvent être modélisés par différentes approches. Deux grandes familles existent :

- L'approche Lagrangienne est l'approche la plus intuitive puisqu'elle consiste à représenter le spray par un ensemble de particules, à suivre chaque particule dans son mouvement et à prédire sa dynamique par un bilan de force (Maxey and Riley 1983). Lorsque le nombre de particules est trop important, les particules de mêmes propriétés (taille, vitesse et température) sont rassemblées dans des groupes. Ces



---

groupes numériques sont transportés et couplés avec la phase porteuse. L'effet de la turbulence sur les particules est pris en compte par des approches stochastiques (Dukowicz 1980). Depuis les travaux de Dukowicz 1980, de nombreuses améliorations ont été apportées pour mieux modéliser la physique du spray. Ces travaux concernent l'atomisation primaire (Reitz and Bracco 1982), les collisions et la coalescence (O'Rourke 1981) ainsi que l'atomisation secondaire (Reitz and Diwakar 1986). La principale difficulté de l'approche Lagrangienne pour la simulation de spray est le nombre important de particules à transporter pour avoir un bon niveau de résolution statistique. Ce grand nombre de particules entraîne un temps de calcul très long, ce qui est d'autant plus crucial que les méthodes Lagrangiennes ne sont pas facilement parallélisables. De plus, le calcul des termes d'échanges entre phases n'est pas toujours évident du fait de la répartition différente de ces termes dans chaque phase (point/volume). Comme le soulignent (Abraham 1997; Iyer and Abraham 1997), un maillage très fin est nécessaire en sortie d'injecteur pour bien reproduire la physique du cisaillement et du mélange air/carburant. Ce maillage très fin entraîne des fractions volumiques de liquide proches de 1 à la sortie de l'injecteur, ce que l'approche Lagrangienne ne permet pas. De plus les maillages très fins imposent un nombre important de particules ce qui alourdit d'autant le temps et la mémoire de calcul. Cette approche est néanmoins la plus couramment utilisée dans la simulation d'injection directe (Iyer and Abraham 1997; Iyer and Abraham 1998) car elle minimise l'effort de modélisation des phénomènes physiques.

- L'approche Eulérienne consiste à observer l'évolution des propriétés du fluide à un endroit donné, par exemple sur un volume de contrôle du maillage. L'approche appelée "Eulérienne bi-fluide" consiste à appliquer des équations de conservation sur la phase liquide comme si elle était continue et ne prend donc pas en compte les gouttes dans leur individualité. Elle est *a priori* plus apte au calcul des écoulements fortement chargés en liquide. C'est l'approche adoptée dans ce travail. Pour obtenir les équations Eulériennes (bi-fluide) de la phase liquide, diverses méthodes existent (Ishii 1975; Simonin 1996; Drew and Passman 1999). On peut citer les méthodes de moyenne volumique (Gray and Lee 1977; Drew 1983) qui consistent à moyenniser les deux phases considérées comme continues dans un volume de contrôle. On peut citer également les approches de moyenne d'ensemble pour lesquelles les propriétés statistiques de la phase dispersée sont décrites par des fonctions densité de probabilité (fdp) puis dérivées pour obtenir des équations de conservation pour des variables continues. Cette approche repose sur la forte analogie entre le mouvement aléatoire des gouttes dans un champ turbulent et le mouvement d'agitation thermique des molécules de gaz décrit par la théorie cinétique des gaz. Des détails de cette approche peuvent être trouvés dans (Simonin 1996; Fevrier et al. 2005; Kaufmann et al. 2006). C'est l'approche utilisée dans le cadre de cette thèse. Ces deux approches Eulériennes seront présentées dans ce manuscrit en partie 1. Il existe également des approches de type "Eulériennes multi-fluides", ou sectionnelles, qui consistent à diviser un brouillard de gouttes en différentes sections, considérées chacune comme un fluide. Une section correspond à un ensemble de gouttes dont la taille varie dans un intervalle. Chaque section est traitée par un système d'équations de conservation,

tout comme pour une approche Eulérienne classique, avec des termes additionnels d'échanges entre sections (Greenberg et al. 1993; Laurent and Massot 2001; Laurent 2002; Laurent et al. 2004; Laurent 2006; Massot 2007). L'approche sectionnelle permet de prendre en compte une dispersion en taille et de gérer des phénomènes dépendant de la taille des gouttes comme la coalescence. Le principal problème est le nombre de sections qui peut être contraignant en temps de calcul pour une application industrielle. Une évolution de ces travaux est proposée par (Dufour and Villedieu 2005; Dufour 2005) qui combinent les idées des méthodes de moments avec une approche sectionnelle pour obtenir un modèle multi-fluide nécessitant moins de sections.

Les méthodes multi-fluides ont été évaluées dans le cadre de la thèse de Stéphane de Chaisemartin à l'EM2C (de Chaisemartin et al. 2009a; de Chaisemartin 2009; de Chaisemartin et al. 2009; de Chaisemartin et al. 2009b; Fréret et al. 2009).

Les approches de type "méthodes des moments" (par exemple la DQMOM pour Direct Quadrature Method of Moments) (Marchisio and Fox 2005) consistent à suivre l'évolution d'une distribution à travers ses différents moments. Les méthodes de type QMOM utilisent des formules de quadratures pour approcher des termes de type intégral non fermés issus de la méthode des moments. Chaque quadrature est définie par un ensemble abscisse (la taille) et poids (taux de présence). La méthode DQMOM permet de suivre les abscisses et les poids au cours de la simulation et ainsi reconstruire les moments. Ces approches Eulériennes représentent divers degrés de complexité selon que l'on veut simuler les effets de polydispersion et/ou de croisements de gouttes. Les dernières évolutions ont été réalisées dans le contexte de la thèse de Damien Kah (EM2C/IFP) en lien avec les travaux de R.O. Fox (Kah et al. 2009; Kah 2009).

Dans le cadre de cette thèse, nous nous limiterons au cas de sprays monodisperses<sup>2</sup> et l'approche bi-fluide a été choisie, d'une part parce que les approches multi-fluide et DQMOM sont toujours en cours de développement pour le calcul 3D turbulent et d'autre part parce que leur temps de calcul est *a priori* très long.

- Afin de combiner les avantages des approches Lagrangiennes et Eulériennes, des méthodes hybrides Euler-Lagrange existent, par exemple le modèle *Eulerian-Lagrangian Spray Atomization* (ELSA) (Demoulin et al. 2007; Lebas et al. 2009) qui utilise un modèle de type Eulérien pour l'atomisation primaire (avec un modèle de mélange) puis un modèle Lagrangien pour le transport des gouttes.

Pour l'application aux sprays Diesel dans des conditions d'injection réalistes, les approches Lagrangiennes sont beaucoup plus utilisées que l'approche Eulérienne bi-fluide (ou multi-fluides). Les travaux les plus récents en spray Diesel avec la formulation bi-fluide (Truchot 2005; Iyer and Abraham 2005; Vessiller 2008) utilisent la simulation RANS. La simulation LES de sprays Diesel est encore plus récente et, tout comme pour la simulation RANS, la majorité des travaux utilisent des approches Lagrangiennes (Kosaka and Kimura 2006; Hori et al. 2006) mais une forte dépendance au maillage est observée et les méthodes numériques ne sont pas adaptées à la LES. Une synthèse des travaux sur la simulation

---

<sup>2</sup>la notion de monodispersion sera présentée ultérieurement

---

LES de sprays, ses enjeux et ses difficultés, est proposée par (Bellan 2000) pour des configurations académiques. Son constat est qu'il existe peu d'études LES 3D de spray traitant des problèmes d'anisotropie, d'inhomogénéité ou de modélisation de sous-maille.

Ainsi, le travail effectué dans cette thèse est, à notre connaissance, le premier consacré à des simulations LES Eulériennes dans des conditions d'injection réalistes.

## Objectifs de thèse et organisation du manuscrit

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'un programme, mis en place à l'IFP, de développement de la simulation aux grandes échelles (LES) pour les moteurs à piston avec le code de calcul AVBP<sup>3</sup>. Des travaux antérieurs à cette thèse ont déjà permis d'adapter le code de calcul AVBP à la simulation des écoulements réactifs dans les moteurs automobiles :

- Moureau (2004) a développé les modèles numériques LES pour le contexte moteur ;
- Richard (2005) a proposé un nouveau modèle de combustion prémélangée adaptée à la LES ;
- Galpin (2007) a travaillé sur la prise en compte de la cinétique chimique détaillée afin de mieux prédire l'auto-inflammation et les polluants (modèle PCM-FPI) ;
- Citons également les travaux de Michel (2008) qui ont en partie porté sur une première approche en combustion non prémélangée en LES.

Une étape importante pour la simulation LES des moteurs à piston concerne la prise en compte des écoulements diphasiques, objet de cette thèse. Des travaux ont déjà été effectués pour la simulation des écoulements diphasiques avec le code AVBP par Boileau et al. (2008), Kaufmann (2004), Mossa (2005), Pascaud (2006) et Riber (2007) au CERFACS. Ces travaux étaient axés sur l'application aux moteurs aéronautiques, caractérisée par :

- Une injection qui n'évolue pas en temps ;
- Une faible vitesse d'injection ;
- Une faible fraction volumique de liquide (hypothèse d'écoulements dilués) ;
- Une faible interaction des gouttes avec les parois.

Dans les moteurs à piston, l'écoulement diphasique est caractérisé par :

- Une injection s'étalant sur une durée limitée du cycle moteur ;
- Des vitesses d'injection pouvant atteindre plusieurs centaines de mètres par seconde ;
- Une fraction volumique de liquide très élevée (proche de 1) en zone proche injecteur ;
- Des interactions gouttes-gouttes ;
- Des interactions des gouttes avec les parois.

Il est donc nécessaire d'adapter les méthodes numériques et la modélisation d'AVBP diphasique aux principaux phénomènes physiques caractéristiques de l'injection directe, en particulier dans les moteurs

---

<sup>3</sup>AVBP est un code de calcul LES codéveloppé par l'IFP et le CERFACS. C'est le code utilisé dans cette thèse

Diesel. On se limite néanmoins ici à l'étude de sprays monodisperses sans interaction avec les parois afin de limiter la complexité du problème. Les effets de polydispersion et de croisement de gouttes seront traités ultérieurement. L'objectif final est d'offrir les bases de la méthodologie pour la simulation LES dans un moteur à injection directe.

Les différents points cités plus haut sont donc repris dans ce manuscrit selon l'organisation décrite ci-dessous :

- **Partie I.** La simulation de sprays dans les moteurs automobile nécessite de remettre en question les équations d'AVBP que l'on notera 'équations standards'. Ainsi, en première partie de ce manuscrit, un état des lieux est fait sur les équations en écoulements 'denses', c'est-à-dire fortement chargés en liquide. Le but de cette partie est d'obtenir les équations bi-fluides en milieu dense par approche volumique ( chapitre 1) ou par approche statistique ( chapitre 2). Les différentes approches seront ensuite comparées (chapitre 3) et discutées dans le cadre de l'injection directe. Même si l'approche volumique n'est pas l'approche privilégiée à l'origine pour l'établissement des équations d'AVBP, elle permet néanmoins d'offrir un point de comparaison intéressant et de comprendre la problématique du filtrage. Les hypothèses utilisées pour le filtrage volumique sont notamment très différentes des hypothèses utilisées pour l'approche statistique.
- **Partie II.** La deuxième partie concerne les adaptations de la modélisation physique et des méthodes numériques préconisées pour simuler les sprays Diesel. Il s'agit principalement de prendre en compte les interactions gouttes-gouttes et de mettre en place de nouveaux outils numériques pour réaliser un calcul moteur ainsi que pour améliorer la robustesse et la précision du code de calcul. Afin de s'affranchir des problèmes de modélisation de l'atomisation primaire, de résolution du cisaillement et des difficultés numériques associés au calcul de la zone proche injecteur, une méthodologie originale est proposée au chapitre 6 pour démarrer le calcul en aval de cette zone proche injecteur. Pour ce faire, une condition limite prenant en compte la physique à la fois dans l'injecteur et à sa sortie, appelée DITurBC a été créée.
- **Partie III.** La troisième partie concerne la validation du code AVBP et des développements des parties I et II par la simulation du spray en condition quasi-stationnaire sur un cas d'injection basse pression (Chaves et al. 2004). Le principal intérêt est de faire une première validation de la dynamique du spray en s'affranchissant des phénomènes transitoires. Les caractéristiques du spray sont analysées après que le jet est pleinement établi. Les propriétés transitoires associées à la fois à la levée de l'aiguille et à la déstabilisation du spray en jet turbulent ne sont pas traitées ici. De plus, le comportement du modèle dans le cas d'une injection réaliste, pour laquelle la pression d'injection peut être dix fois plus élevée, doit être encore validé.
- **Partie IV.** C'est l'objet de la dernière partie où les résultats de simulation sont comparés à des mesures faites en chambres pressurisées pour différentes pressions d'injection. Une étude de sensibilité sur les paramètres importants de la condition limite d'injection DITurBC est également présentée. Pour aller plus loin dans la compréhension des phénomènes de déstabilisation des spray, les premiers instants de

---

l'injection sont étudiés à travers l'évolution des structures turbulentes et des champs de basse pression. Enfin, le chapitre (8) est consacré au premier calcul sur moteur à injection directe. L'objectif principal est de démontrer la faisabilité d'un calcul moteur à injection directe avec toutes les modifications apportées au code AVBP et ainsi de déceler les difficultés et faiblesses potentielles. Cette première simulation d'un cas moteur permet également d'évaluer la facilité de mise en œuvre de la condition limite décalée DITurBC présentée au chapitre 6.

## Introduction

---

Les différents résultats et apports de cette thèse sont finalement résumés dans le chapitre de conclusion. Les perspectives et le travail restant à accomplir sont également discutés.

**Première partie**

**Modélisation bi-fluide**





---

## Introduction

Les méthodes multi-fluides ainsi que les méthodes de quadrature de moments sont encore en développement et posent à la fois des problèmes de temps de calcul trop longs pour des applications industrielles et des problèmes de fermeture et d'implantation dans un code de calcul 3D en géométrie complexe. Devant ces limitations et le besoin de converger rapidement vers une méthode de calcul de spray Diesel en configuration industrielle, une approche bi-fluides est utilisée dans le cadre de cette thèse. Parmi les approches bi-fluides, de nombreux types de modélisations existent (Ishii 1975; Gray and Lee 1977; Drew 1983; Drew and Passman 1999). Les moyennes temporelles, à partir d'équations de Navier-Stokes pour chacune des phases, sont écartées d'emblée pour la simulation LES. On se concentre dans cette partie sur la dérivation des équations eulériennes par :

- approche volumique des équations de Navier-Stokes ;
- approche statistique, par analogie avec la théorie cinétique des gaz.

La modélisation de la phase liquide dans le code AVBP repose sur une approche statistique à partir de fonctions densité de probabilité développée dans le cadre d'écoulement diphasiques dispersés et fortement dilués (Kaufmann 2004) pour l'application aux moteurs aéronautiques. Les fractions volumiques du liquide sont donc très faibles (inférieures à  $10^{-4}$ ), les gouttes n'interagissent pas entre elles et leur influence sur le gaz est négligeable. Ces conditions sont très différentes des conditions observées en injection directe où les fractions volumiques de liquide peuvent atteindre l'unité. La simulation de sprays dans les moteurs automobiles nécessite donc de remettre en question les équations d'AVBP que l'on notera 'équations standards'.

Les équations diphasiques bi-fluides en milieu dense sont obtenues d'abord par approche volumique ( chapitre 1) puis par approche statistique ( chapitre 2). Les deux approches sont ensuite comparées (chapitre 3) et discutées dans le cas de l'injection directe.

---

# Chapitre 1

## Approche volumique

L'approche volumique a été utilisée à l'origine pour les milieux poreux par [Whitaker \(1966\)](#). La méthode est présentée pour des milieux diphasiques avec changement de phase dans ([Whitaker 1999](#)). Cette méthode est généralement utilisée pour des simulations RANS mais son utilisation dans le cas de la simulation LES de sprays turbulents est proposée et discutée par [Sirignano \(2005\)](#).

L'approche volumique est intéressante pour la simulation LES de spray puisqu'elle se rapproche de la notion de filtre spatial utilisé en LES. Elle consiste à appliquer les équations de Navier-Stokes à chaque phase par l'intermédiaire d'une fonction indicatrice de phase. Ces équations sont ensuite moyennées au sens du volume sur un volume de contrôle. La principale difficulté dans ce type d'approche est de prendre en compte correctement les échanges à l'interface gaz/liquide et notamment le mouvement fluctuant.

### 1.1 Définitions

On considère un milieu diphasique et on écrit les équations de Navier-Stokes pour un élément fluide sans indiquer dans quelle phase on se trouve.

On note :

- $\rho$  la masse volumique du fluide ;
- $u_i$  la vitesse projetée sur l'axe  $i$  ;
- $\sigma_{i,j}$  la composante  $(i, j)$  du tenseur des contraintes ;
- $\tau_{i,j}$  le tenseur des contraintes visqueuses ;
- $y_\phi$  la fraction massique de l'espèce  $\phi$  ;
- $q_j$  la projection suivant l'axe  $j$  du flux moléculaire de chaleur ;
- $D_\phi$  le coefficient de diffusion de l'espèce  $\phi$  ;
- $p$  la pression ;
- $h$  l'enthalpie ;

–  $e_t$  l'énergie totale non chimique, qui est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie sensible.

Les équations de conservation de Navier-Stokes pour un fluide compressible multi-espèces sont (Poinsot and Veynante 2005) :

$$\text{Conservation de la masse} : \frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (1.1)$$

$$\text{Conservation des espèces} : \frac{\partial}{\partial t} \rho y_\phi + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j y_\phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D_\phi \frac{\partial}{\partial x_j} y_\phi \right) \quad (1.2)$$

$$\text{Conservation de la quantité de mouvement} : \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij} \quad (1.3)$$

$$\text{Conservation de l'enthalpie} : \frac{\partial}{\partial t} \rho h + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j h) = - \frac{\partial}{\partial x_j} q_j + \frac{d}{dt} p + \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} \text{Conservation de l'énergie totale} : \frac{\partial}{\partial t} \rho e_t + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j e_t) &= - \frac{\partial}{\partial x_j} (p u_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} q_j \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{i,j} u_i) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Pour un milieu diphasique, le système d'équations doit être complété par la fonction indicatrice de phase  $\chi_k$  définie par :

- $\chi_k = 1$  , dans la phase  $k$
- $\chi_k = 0$  , ailleurs

Elle est régie par une équation de transport (Eq. 1.6) (Gray and Lee 1977; Whitaker 1985; Whitaker 1999) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \chi_k + V_j \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k = 0 \quad (1.6)$$

où  $V_j$  est la vitesse de l'interface. La fonction indicatrice de phase possède les propriétés suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k = -n_{k,j} \delta_{k,l} \quad \text{donc} \quad \frac{\partial}{\partial t} \chi_k = V_j n_{k,j} \delta_{k,l} \quad (1.7)$$

où  $n_{k,j}$  représente la normale sortante de la phase  $k$  projetée sur l'axe normalisé de direction  $j$  et  $\delta_{k,l}$  représente la fonction de Dirac sur l'interface du côté de la phase  $k$ .

Les équations pour chaque phase sont ensuite obtenues en appliquant un opérateur volumique aux Eq. (1.1) à Eq. (1.5) multipliées par la fonction indicatrice.

Cet opérateur correspond à l'application d'un filtre spatial noté  $\langle \rangle$ , basé sur la moyenne sur un volume fictif de contrôle  $\Omega$ .

Cet opérateur commute avec les opérateurs de dérivation :

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle f \rangle}{\partial t} \quad (1.8)$$

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x} \right\rangle = \frac{\partial \langle f \rangle}{\partial x} \quad (1.9)$$

## 1.1 Définitions

---

Cet opérateur correspond à l'application d'un filtre spatial noté  $\langle \rangle$ , basé sur la moyenne sur un volume fictif de contrôle  $\Omega$ .

Ainsi, la fraction volumique  $\alpha_k$  de la phase  $k$  est définie par :

$$\alpha_k \equiv \langle \chi_k \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \chi_k d\Omega \quad (1.10)$$

On obtient la fraction massique  $\alpha_k \rho_k$  :

$$\alpha_k \rho_k \equiv \langle \chi_k \rho \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \chi_k \rho d\Omega \quad (1.11)$$

On note  $\bar{F}_k$  la valeur filtrée de toute grandeur  $f$  associée à la phase  $k$  :

$$\alpha_k \bar{F}_k \equiv \langle \chi_k f \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \chi_k f d\Omega \quad (1.12)$$

La fluctuation, notée  $f'$ , est définie par  $f' \chi_k = \chi_k (f - \bar{F}_k)$  et  $\langle f' \chi_k \rangle = 0$ .

On note  $F_k$  la valeur filtrée pondérée par la masse, de toute grandeur  $f$  associée à la phase  $k$ .  $F_k$  est donc une moyenne de Favre pour la phase  $k$  et s'écrit :

$$F_k \equiv \frac{\langle \chi_k \rho f \rangle}{\langle \chi_k \rho \rangle} = \frac{\langle \chi_k \rho f \rangle}{\alpha_k \rho_k} \quad (1.13)$$

La fluctuation par rapport à  $F_k$  notée  $f''$  de toute grandeur  $f$  est définie par  $f'' \chi_k = \chi_k (f - F_k)$  et  $\langle f'' \rho \chi_k \rangle = 0$ .

Ainsi pour toutes grandeurs  $f_1, f_2$ , on peut écrire :

$$\chi_k f_1 = F_{k,1} \chi_k + f_1'' \chi_k \quad (1.14)$$

$$\chi_k f_2 = F_{k,2} \chi_k + f_2'' \chi_k \quad (1.15)$$

En multipliant Eq. (1.14) par Eq. (1.15) on obtient :

$$\chi_k f_1 \chi_k f_2 = (F_{k,1} \chi_k + f_1'' \chi_k) (F_{k,2} \chi_k + f_2'' \chi_k) \quad (1.16)$$

$$\chi_k f_1 f_2 = F_{k,1} F_{k,2} \chi_k + F_{k,2} f_1'' \chi_k + F_{k,1} f_2'' \chi_k + f_1'' f_2'' \chi_k \quad (1.17)$$

Soit en appliquant le filtre volumique pondéré par la masse :

$$\langle \chi_k \rho f_1 f_2 \rangle = \langle F_{k,1} F_{k,2} \rho \chi_k \rangle + \underbrace{\langle F_{k,2} f_1'' \rho \chi_k \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle F_{k,1} f_2'' \rho \chi_k \rangle}_{=0} + \langle f_1'' f_2'' \rho \chi_k \rangle \quad (1.18)$$

On en déduit la relation Eq. (1.19), pour toutes grandeurs  $f_1, f_2$ , qui sera largement utilisée par la suite :

$$\langle \chi_k \rho f_1 f_2 \rangle = F_{k,1} F_{k,2} \rho_k \alpha_k + \langle f_1'' f_2'' \rho \chi_k \rangle \quad (1.19)$$

## 1.2 Méthode de dérivation

Afin d'obtenir les équations eulériennes diphasiques moyennées à partir des équations de Navier-Stokes monophasiques, la méthode consiste à :

- multiplier chaque équation monophasique par  $\chi_k$  ;
- appliquer le filtre volumique ;
- utiliser les relations de commutation ;
- modéliser les termes non fermés.

On écrit l'équation générale (Eq. 1.20) de conservation de toute grandeur physique  $\psi$  transportée à la vitesse  $u_j$  et dans laquelle  $s_{i,j}$  désigne les composantes  $(i, j)$  d'un tenseur :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \psi + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho \psi u_j = \frac{\partial}{\partial x_j} s_{ij} \quad (1.20)$$

En suivant la méthodologie précédente, on obtient :

$$\chi_k \frac{\partial}{\partial t} \rho \psi + \chi_k \frac{\partial}{\partial x_j} \rho \psi u_j = \chi_k \frac{\partial}{\partial x_j} s_{ij} \quad (1.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \chi_k \rho \psi + \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho \psi u_j = \rho \psi \frac{\partial}{\partial t} \chi_k + \rho \psi u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k s_{ij} - s_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \quad (1.22)$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \chi_k \rho \psi \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho \psi u_j \right\rangle = \left\langle \rho \psi (u_j - V_j) \frac{\partial \chi_k}{\partial x_j} \right\rangle - \left\langle s_{i,j} \frac{\partial \chi_k}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \chi_k s_{ij}}{\partial x_j} \right\rangle \quad (1.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\langle \chi_k \rho \psi \right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\langle \chi_k \rho \psi u_j \right\rangle = \left\langle (s_{i,j} - \rho \psi (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,l} \right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\langle \chi_k s_{ij} \right\rangle \quad (1.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k \Psi_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k \Psi_k U_{k,j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{S}_{k,i,j} + \underbrace{\left\langle (s_{i,j} - \rho \psi (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,l} \right\rangle}_{\text{Échange de } \rho \psi \text{ et de } s_{i,j} \text{ à l'interface}} \\ &- \underbrace{\left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho \psi''_i u''_j \right\rangle}_{\text{Fluctuation intra-volumique ou sous-maille}} \end{aligned} \quad (1.25)$$

## 1.3 Équation de continuité

A partir de l'équation (1.1) et en utilisant la méthode décrite en section (1.2) avec  $\psi = 1$  et  $s_{i,j} = 0$ , on obtient l'équation de continuité de la phase  $k$  :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k U_{k,j} = \Gamma_k \quad (1.26)$$

Le terme d'échange massique de la phase  $k$  est noté  $\Gamma_k = \langle -\rho(u_j - V_j)n_{k,j}\delta_{k,I} \rangle$ .

L'équation de continuité pour la phase  $k$  ne fait donc pas intervenir de terme de fluctuations de sous-maille, seul le terme d'échange massique à l'interface est à modéliser.

## 1.4 Équation de quantité de mouvement

A partir de l'équation (1.3) et en utilisant la méthode décrite en section (1.2) avec  $\psi = u_i$  et  $s_{i,j} = \sigma_{ij}$ , et en notant  $\sigma_{ij} = -p\delta_{i,j} + \tau_{ij}$  et  $\bar{\Sigma}_{k,ij} = \langle \chi_k \sigma_{ij} \rangle = -\bar{P}_k \delta_{i,j} + \bar{T}_{k,ij}$  où  $\bar{P}_k = \langle \chi_k p \rangle$  et  $\bar{T}_{k,ij} = \langle \chi_k \tau_{ij} \rangle$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k U_{k,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k U_{k,i} U_{k,j} &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{P}_k \delta_{i,j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{T}_{k,ij} \\ &+ \langle (\tau_{ij} - \rho u_i (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle \\ &+ \langle -p \delta_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle \\ &- \langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho u_i'' u_j'' \rangle \end{aligned} \quad (1.27)$$

Pour plus de clarté, on note  $p_I$  la pression à l'interface, permettant d'écrire :

$$-p \delta_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,I} = -p_I n_{k,i} \delta_{k,I}$$

On partage le terme de pression à l'interface  $p_I$  en un terme moyen au sens du volume  $\bar{P}_{k,I}$  et un terme fluctuant  $p'_I$  tels que  $p_I = \bar{P}_{k,I} + p'_I$ , ce qui permet d'obtenir :

$$\langle -p_I n_{k,i} \delta_{k,I} \rangle = \langle -p'_I n_{k,i} \delta_{k,I} \rangle - \bar{P}_{k,I} \langle n_{k,i} \delta_{k,I} \rangle \quad (1.28)$$

$$= \langle -p'_I n_{k,i} \delta_{k,I} \rangle + \bar{P}_{k,I} \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_k \quad (1.29)$$

d'où :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k U_{k,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k U_{k,i} U_{k,j} &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{P}_k \delta_{i,j} + \bar{P}_{k,I} \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{T}_{k,ij} \\ &+ \langle (\tau_{ij} - \rho u_i (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle \\ &+ \langle -p'_I n_{k,i} \delta_{k,I} \rangle - \langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho u_i'' u_j'' \rangle \end{aligned} \quad (1.30)$$

et après réarrangement :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k U_{k,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k U_{k,i} U_{k,j} &= -\alpha_k \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P}_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{T}_{k,ij} \\
 &+ (\bar{P}_{k,I} - \bar{P}_k) \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_k \\
 &+ \langle (\tau_{ij} - \rho u_i (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle \\
 &+ \langle -p'_I n_{k,i} \delta_{k,I} \rangle - \langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho u'_i u'_j \rangle
 \end{aligned} \quad (1.31)$$

L'apparition d'une pression pour la phase dispersée  $\bar{P}_k$  peut surprendre. On peut voir cette pression comme la moyenne sur tout le volume de contrôle des pressions de liquide à l'intérieur de chaque goutte. Dans le cas d'une phase liquide continue dense, cette pression équivaut à la pression à l'intérieur de la phase liquide.

L'équation (1.31) fait apparaître différents termes au membre de droite :

- Le terme  $(\bar{P}_{k,I} - \bar{P}_k) \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_k$  peut-être négligé en égalisant, pour chaque phase  $k$ , la pression interfaciale moyenne avec la pression moyenne et en faisant l'hypothèse d'une pression interfaciale unique pour les deux phases :

$$\bar{P}_{g,I} = \bar{P}_{l,I} = \bar{P}_l = \bar{P}_g \quad (1.32)$$

où les indices  $g$  et  $l$  désignent le gaz et le liquide.

- Pour la phase dispersée le terme de contrainte visqueuse  $\bar{T}_{l,ij}$  est négligé ici car on ne considère pas l'écoulement interne de la phase dispersée. Cela n'est en revanche pas correct pour un écoulement dense comme une colonne de liquide.
- Les termes  $\langle (\tau_{ij} - \rho u_i (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle$  et  $\langle -p'_I n_{k,i} \delta_{k,I} \rangle$  représentent les termes d'échange de quantité de mouvement à l'interface :
  - Le terme  $F_{ext_{k,i}} = \langle (\tau_{ij} n_{k,j} \delta_{k,I}) \rangle + \langle -p'_I n_{k,i} \delta_{k,I} \rangle$  représente l'action des forces de contact de la phase porteuse sur la particule, c'est-à-dire la traînée mais pas la force d'Archimède qui est contenue dans le terme  $-\alpha_k \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P}_g$ . Le recours à la pression interfaciale n'est pas obligatoire. Pour certains auteurs comme Prosperetti and Jones (1984), le terme  $\langle (\sigma_{ij} - \bar{\Sigma}_{k,ij}) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle$  représente la force aérodynamique (due à la pression et à la viscosité) par unité de volume appliquée aux gouttes.
  - Le terme  $\langle (-\rho u_i (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle$  représente l'échange de quantité de mouvement dû à l'évaporation. D'après Ishii (1975), la vitesse de la phase  $k$  à l'interface est égale à la vitesse moyennée de la phase dispersée  $U_{l,i}$ . Faire cette hypothèse revient aussi à négliger les termes de fluctuation de vitesse à l'interface. Avec cette hypothèse, on peut écrire le terme d'échange sous la forme :

$$\langle (-\rho u_i (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle = \langle (-\rho U_{l,i} (u_j - V_j)) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle \quad (1.33)$$

$$= U_{l,i} \Gamma_k \quad (1.34)$$

- Le terme  $\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho u'_i u'_j \rangle$  est le terme de fluctuation ou d'agitation de sous-maille.



## 1.5 Équation de conservation des espèces

On obtient finalement l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k U_{k,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k U_{k,i} U_{k,j} &= -\alpha_k \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P}_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{T}_{k,i,j} \\ &+ F_{ext,k,i} + U_{l,i} \Gamma_k \\ &- \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho u_i'' u_j'' \right\rangle \end{aligned} \quad (1.35)$$

## 1.5 Équation de conservation des espèces

En notant la vitesse de diffusion de l'espèce  $\phi$  :  $v_{D,\phi,j} = -\frac{D_\phi}{y_\phi} \left( \frac{\partial}{\partial x_j} y_\phi \right)$ , l'équation (1.2) s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho y_\phi + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho (u_j + v_{D,\phi,j}) y_\phi = 0 \quad (1.36)$$

En utilisant la même méthode que pour l'équation de quantité de mouvement on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k Y_{\phi,k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k Y_{\phi,k} (U_{j,k} + V_{D,\phi,j,k}) = \left\langle -\rho y_\phi (u_j + v_{D,\phi,j} - V_j) n_{k,j} \delta_{k,l} \right\rangle - \frac{\partial}{\partial x_j} \left\langle \chi_k \rho y_\phi'' u_j'' \right\rangle \quad (1.37)$$

La vitesse de diffusion moyenne peut être modélisée en supposant qu'elle est égale au produit des valeurs moyennes  $D_{\phi,k}$ ,  $Y_{\phi,k}$  et du gradient moyen  $\frac{\partial}{\partial x_j} Y_{\phi,k}$  :

$$V_{D,\phi,j,k} = -\frac{D_{\phi,k}}{Y_{\phi,k}} \frac{\partial}{\partial x_j} Y_{\phi,k} \quad (1.38)$$

On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k Y_{\phi,k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k Y_{\phi,k} U_{k,j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \alpha_k \rho_k D_{\phi,k} \frac{\partial}{\partial x_j} Y_{\phi,k} \right) + \underbrace{\left\langle -\rho y_\phi (u_j + v_{D,\phi,j} - V_j) n_{k,j} \delta_{k,l} \right\rangle}_{\text{Échange massique d'espèce à l'interface}} \\ &- \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho y_\phi'' u_j'' \right\rangle \end{aligned} \quad (1.39)$$

La fraction massique  $Y_\phi$  à l'interface vaut 1 si  $\phi$  est l'espèce de la phase liquide (le carburant) et 0 sinon. Le terme d'échange massique vaut donc :

$$\left\langle -\rho y_\phi (u_j + v_{D,\phi,j} - V_j) n_{k,j} \delta_{k,l} \right\rangle = \delta_{\phi,F} \left\langle -\rho (u_j + v_{D,\phi,j} - V_j) n_{k,j} \delta_{k,l} \right\rangle \quad (1.40)$$

où l'indice  $F$  indique le carburant.

On décompose le terme d'échange en un terme d'échange par évaporation/condensation  $\Gamma_g$  et un terme d'échange par diffusion moléculaire  $\Gamma_{D,g}$  :

$$\langle -\rho(u_j + v_{D,\phi,j} - V_j)n_{k,j}\delta_{k,I} \rangle = \delta_{\phi,F} \underbrace{\langle -\rho(u_j - V_j)n_{k,j}\delta_{k,I} \rangle}_{\Gamma_g} + \delta_{\phi,F} \underbrace{\langle -\rho(v_{D,\phi,j})n_{k,j}\delta_{k,I} \rangle}_{\Gamma_{D,g}} \quad (1.41)$$

Les termes  $\Gamma_g$ ,  $\Gamma_{D,g}$  et  $\langle \chi_g \rho y''_{\phi} u''_j \rangle$  sont à modéliser.

Sous l'hypothèse qu'il n'y a pas de condensation et que la phase dispersée n'est constituée que d'une seule espèce, l'équation n'est utile que pour la phase gazeuse notée  $g$ .

Ainsi :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g Y_{\phi,g} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g Y_{\phi,g} U_{g,j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g D_{\phi,g} \frac{\partial}{\partial x_j} Y_{\phi,g} + \delta_{\phi,F} \Gamma_g + \delta_{\phi,F} \Gamma_{D,g} - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_g \rho y''_{\phi} u''_j \rangle \quad (1.42)$$

Par la suite, on négligera le terme de diffusion moléculaire à l'interface en faisant l'hypothèse que le terme d'évaporation est prépondérant étant donné les fortes températures dans une chambre de combustion ( $\Gamma_{D,g} \ll \Gamma_g$ ).

## 1.6 Équation de l'enthalpie sensible

On effectue le même type d'opération pour l'équation (1.4) de l'enthalpie sensible. Cette équation n'est utilisée que pour la phase liquide (l'énergie totale est utilisée pour la phase gazeuse). On obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l H_{s_l} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_l \rho_l U_{l,j} H_{s_l}) &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_l \bar{Q}_{j,l} + \langle \chi_k \frac{d}{dt} p \rangle + \langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i \rangle \\ &+ \langle -\rho h_s (u_j - V_j) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle - \langle q_j n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle \\ &- \langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho h''_s u''_j \rangle \end{aligned} \quad (1.43)$$

Le terme de variation de pression peut s'écrire :

## 1.6 Équation de l'enthalpie sensible

$$\langle \chi_k \frac{d}{dt} p \rangle = \langle \chi_k \frac{\partial}{\partial t} p \rangle + \langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle \quad (1.44)$$

$$= \langle \frac{\partial}{\partial t} p \chi_k \rangle - \langle p \frac{\partial}{\partial t} \chi_k \rangle + \langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle \quad (1.45)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \bar{P}_k - \langle p \frac{\partial}{\partial t} \chi_k \rangle + \langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle \quad (1.46)$$

$$= \alpha_l \frac{\partial}{\partial t} \bar{P}_k + \bar{P}_k \frac{\partial}{\partial t} \alpha_l - \langle p \frac{\partial}{\partial t} \chi_k \rangle + \langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle \quad (1.47)$$

$$= \alpha_l \frac{\partial}{\partial t} \bar{P}_k + \bar{P}_k \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi_k \rangle - \langle p \frac{\partial}{\partial t} \chi_k \rangle + \langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle \quad (1.48)$$

$$= \alpha_l \frac{\partial}{\partial t} \bar{P}_k + \langle (\bar{P}_k - p) \frac{\partial}{\partial t} \chi_k \rangle + \langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle \quad (1.49)$$

$$= \alpha_l \frac{\partial}{\partial t} \bar{P}_k + \langle (\bar{P}_k - p) V_j n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle + \langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle \quad (1.50)$$

Avec l'hypothèse de pression unique à l'interface, on a  $\langle (\bar{P}_k - p) V_j n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle = 0$  et avec l'hypothèse d'égalité des variations de pression dans chaque phase, à savoir :  $\frac{d}{dt} \bar{P}_k = \frac{d}{dt} \bar{P}_g$ , on obtient donc :

$$\langle \chi_k \frac{d}{dt} p \rangle = \alpha_l \frac{\partial}{\partial t} \bar{P}_g + \langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle \quad (1.51)$$

De plus  $\langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle$  peut se réécrire, en éliminant les termes faisant apparaître des fluctuations de vitesse à l'interface :

$$\langle \chi_k u_j \frac{\partial}{\partial x_j} p \rangle = \alpha_l U_{l,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{P}_g + \underbrace{\langle U_{l,j} ((p - \bar{P}_k)) n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle}_{=0} + \langle \chi_k u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} p' \rangle \quad (1.52)$$

En rassemblant les termes, on aboutit à l'équation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l H_{s_l} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_l \rho_l U_{l,j} H_{s_l}) &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_l \bar{Q}_{j,l} + \alpha_l \frac{d}{dt} \bar{P}_g + \langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i \rangle \\ &+ \langle -\rho h_s (u_j - V_j) n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle - \langle q_j n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle \\ &+ \langle \chi_k u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} p' \rangle - \langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rho h_s'' u_j'' \rangle \end{aligned} \quad (1.53)$$

On décompose le terme de dissipation visqueuse de la manière suivante :

$$\langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i \rangle = \langle \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k u_i \rangle - \langle u_i \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rangle \quad (1.54)$$

$$= \langle \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k u_i \rangle + \langle u_i \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle \quad (1.55)$$

$$= \langle \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k U_{k,i} \rangle + \langle \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k u'_i \rangle + \langle u_i \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle \quad (1.56)$$

$$= \langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} U_{l,i} \rangle + \langle U_{l,i} \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rangle + \langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u'_i \rangle \\ + \langle u'_i \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k \rangle + \langle u_i \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle \quad (1.57)$$

$$= \langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} U_{l,i} \rangle + \langle (u_i - U_{l,i}) \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle + \langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u'_i \rangle \\ - \langle u'_i \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle \quad (1.58)$$

De plus :

$$\langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u'_i \rangle = \langle \chi_k \bar{T}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} u'_i \rangle + \langle \chi_k \tau'_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u'_i \rangle \\ = T_{l,ij} \underbrace{\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_k u'_i \rangle}_{=0} + \bar{T}_{l,ij} \langle u'_i n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle \\ = \alpha_l \bar{T}_{l,j,l} \frac{\partial}{\partial x_j} U_{l,i} + \langle (u_i - U_{l,i}) \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle + \\ + \langle u'_i (\bar{T}_{l,ij} - \tau_{i,j}) n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle + \langle \chi_k \tau'_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u'_i \rangle \quad (1.59)$$

D'après l'hypothèse (p.28), la vitesse  $u_i$  à l'interface est équivalente à la vitesse de la phase liquide, les fluctuations  $u'_i$  à l'interface sont nulles. Ainsi les deux termes  $\langle (u_i - U_{l,i}) \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle$ ,  $\langle u'_i (\bar{T}_{l,ij} - \tau_{i,j}) n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle$  sont nuls. Ceci revient à négliger l'échauffement par friction à l'interface.

En conclusion pour le terme de dissipation visqueuse :

$$\langle \chi_k \tau_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i \rangle = \underbrace{\alpha_l \bar{T}_{l,j,l} \frac{\partial}{\partial x_j} U_{l,i}}_{=0} + \underbrace{\langle \chi_k \tau'_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u'_i \rangle}_{\text{Dissipation visqueuse de sous-maille}} \quad (1.60)$$

En regroupant les termes et en utilisant la relation (1.7), l'équation devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l H_{s_l} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_l \rho_l U_{l,j} H_{s_l}) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_l \bar{Q}_{j,l} + \alpha_l \frac{d}{dt} \bar{P}_g \\ + \langle -\rho h_s (u_j - V_j) n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle - \langle q_j n_{k,j} \delta_{k,l} \rangle \\ + \langle \chi_k u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} p' \rangle + \langle \chi_k \tau'_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u'_i \rangle - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k \rho h''_s u''_j \rangle \quad (1.61)$$

## 1.7 Équation de l'énergie totale

Enfin, le terme de diffusion de chaleur dans la phase liquide  $Q_{j,l}$  est négligé.

On peut regrouper les termes de la façon suivante :

- Les termes d'échanges interfaciaux :

$$\Lambda_l = \underbrace{\langle -\rho h_s(u_j - V_j)n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle}_{\text{Échange d'enthalpie sensible par évaporation}} \quad (1.62)$$

$$\Phi_l = \underbrace{-\langle q_j n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle}_{\text{Transfert thermique à l'interface (convection/conduction)}} \quad (1.63)$$

- Les termes de fluctuations de sous maille :

$$SGS_k = -\frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k \rho h_s'' u_j'' \rangle + \langle \chi_k u_j' \frac{\partial}{\partial x_j} p' \rangle + \langle \chi_k \tau_{i,j}' \frac{\partial}{\partial x_j} u_i' \rangle \quad (1.64)$$

On néglige les termes contenant les fluctuations de pression en sous-maille ainsi que les fluctuations du tenseur de viscosité. Les termes  $\langle \chi_k p' u_j' \rangle$  et  $\langle \chi_k \tau_{i,j}' u_i' \rangle$  sont négligeables devant les termes d'échange d'enthalpie par évaporation qui sont prépondérants en application moteur.

L'équation de l'enthalpie sensible pour la phase dispersée s'exprime alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l H_{s_l} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_l \rho_l U_{l,j} H_{s_l}) = \Lambda_l + \Phi_l - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k \rho h_s'' u_j'' \rangle + \alpha_l \frac{d}{dt} \bar{P}_g \quad (1.65)$$

## 1.7 Équation de l'énergie totale

On part de l'équation (1.5) et en utilisant la même méthodologie, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k E_{t_k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k U_{k,j} E_{t_k} &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{P}_k U_{k,j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{Q}_{k,j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{T}_{k,i,j} U_{k,i} \\ &\quad - \langle \rho e_t(u_j - V_j)n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle + \langle (-pu_j - q_j + \tau_{i,j}u_i)n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k p' u_j' \rangle - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k \tau_{i,j}' u_i' \rangle - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k \rho e_i'' u_j'' \rangle \end{aligned} \quad (1.66)$$

- Les termes d'échanges interfaciaux se simplifient en utilisant l'hypothèse de pression unique :

$$\begin{aligned} \Pi_k^{tot} &= \langle -\rho e_t(u_j - V_j)n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle + \langle (-pu_j - q_j + \tau_{i,j}u_i)n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle \\ &= \langle -\rho h_s(u_j - V_j)n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle + \langle p(u_j - V_j)n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle \\ &\quad + \langle -pu_j n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle - \langle q_j n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{2} \langle \rho u_i^2(u_j - V_j)n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle}_{\text{Échange d'énergie cinétique entre phases}} + \underbrace{\langle u_i \tau_{i,j} n_{k,j}\delta_{k,l} \rangle}_{\text{Travail des forces de surface}} \end{aligned} \quad (1.67)$$

D'après l'hypothèse (p.28), la vitesse  $u_i$  à l'interface est équivalente à la vitesse de la phase liquide  $U_{l,i}$ . Ainsi, le transfert d'énergie cinétique entre phases à l'interface devient :

$$\frac{1}{2} \langle -\rho u_i^2 (u_j - V_j) n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle \approx \frac{1}{2} U_{l,i}^2 \Gamma_k \quad (1.68)$$

- Les termes turbulents s'écrivent :

$$SG_k^t = -\frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k p' u_j' \rangle - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k \tau'_{i,j} u_i' \rangle - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k \rho_k e_i'' u_j'' \rangle \quad (1.69)$$

Pour le travail des forces de surface, on a :

$$\langle u_i \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle = U_{l,i} \underbrace{\langle \tau_{i,j} n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle}_{\text{Force extérieure}} = U_{l,i} F_{ext,k,i} \quad (1.70)$$

De plus, le terme  $\langle p V_j n_{k,j} \delta_{k,I} \rangle$  s'écrit  $\bar{P}_g \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k$ .

On néglige les termes contenant les fluctuations de pression en sous-maille ainsi que les fluctuations du tenseur de viscosité. Comme pour l'enthalpie liquide, les termes  $\langle \chi_k p' u_j' \rangle$  et  $\langle \chi_k \tau'_{i,j} u_i' \rangle$  sont négligeables devant les termes d'échange d'enthalpie par évaporation.

Finalement l'équation de conservation de l'énergie totale est :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k E_{t_k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \rho_k (E_{t_k} + P_k / \rho_k) U_{k,j} &= -\bar{P}_g \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k - \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{Q}_{k,j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_k \bar{T}_{k,i,j} U_{k,i} \\ &+ \frac{1}{2} U_{l,i}^2 \Gamma_k + U_{l,i} F_{ext,k,i} \\ &+ \Lambda_k + \Phi_k - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi_k \rho_k e_i'' u_j'' \rangle \end{aligned} \quad (1.71)$$

## 1.8 Conservation de l'énergie du système

Il est nécessaire de vérifier que le système diphasique est bien conservatif pour la masse, la quantité de mouvement et l'énergie totale du système. La conservation de la masse et de la quantité de mouvement est immédiate. Pour l'énergie, elle est démontrée ci-dessous.

On considère un volume fermé  $V$  contenant un milieu diphasique (cf. Fig. 1.1) de masse  $m$  et de masse volumique  $\rho$  telle que :  $m = \rho V = \int_V \alpha_l \rho_l + \alpha_g \rho_g dV$

Ce volume est fermé ce qui signifie qu'il n'y a aucun échange de masse, de quantité de mouvement ni d'énergie avec l'extérieur. De plus, on choisit ce volume tel qu'il soit égal au volume de contrôle  $\Omega$  sur lequel les équations ont été filtrées (cf. section §1.1).

Pour qu'il y ait conservation de l'énergie totale  $E$  du système, il faut que  $\frac{dE}{dt} = 0$ .

Or,

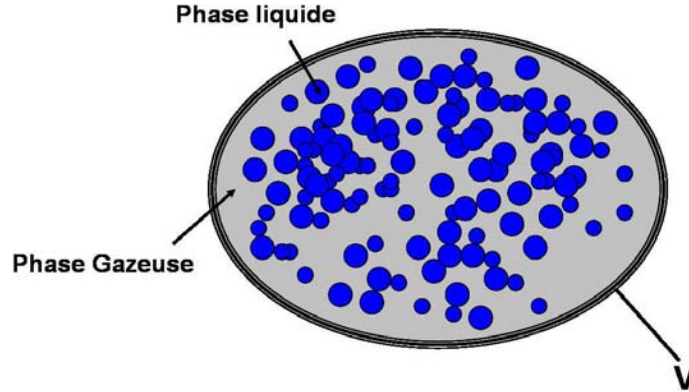


FIG. 1.1 – Volume fermé d'intégration

$$m \frac{dE}{dt} = \frac{dmE}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \alpha_g \rho_g E_g dV + \frac{d}{dt} \int_V \alpha_l \rho_l E_l dV \quad (1.72)$$

$$= \int_V \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g E_g dV + \int_V \frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l E_l dV \quad (1.73)$$

L'intégrale des flux de toute grandeur  $\Xi_j$  sur un volume fermé est nul :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x_j} \Xi_j dV = 0 \quad (1.74)$$

A partir de l'équation (1.71), en utilisant la remarque sur l'intégrale des flux, et en remarquant que  $\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g + \frac{\partial}{\partial t} \alpha_l = 0$  on obtient :

$$\begin{aligned} m \frac{dE}{dt} &= \int_V \left( \left( \frac{1}{2} U_{l,i}^2 \right) \Gamma_g + U_{l,i} F_{ext_{g,i}} + \Lambda_g + \Phi_g \right) dV \\ &\quad + \int_V \left( \left( \frac{1}{2} U_{l,i}^2 \right) \Gamma_l + U_{l,i} F_{ext_{l,i}} + \Lambda_l + \Phi_l \right) dV \end{aligned} \quad (1.75)$$

Comme  $\Gamma_g = -\Gamma_l$  et  $F_{ext_{g,i}} = -F_{ext_{l,i}}$ , on obtient :

$$m \frac{dE}{dt} = \int_V (\Lambda_g + \Phi_g + \Lambda_l + \Phi_l) dV \quad (1.76)$$

La conservation d'énergie implique donc qu'en tout point :

$$\Lambda_g + \Phi_g + \Lambda_l + \Phi_l = 0 \quad (1.77)$$

La modélisation de ces termes sera présentée en section 2.4.3.

## 1.9 Bilan des équations par approche volumique

Les équations obtenues pour la phase gazeuse, en utilisant la relation d'égalité (1.77) pour la conservation de l'énergie totale, sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g U_{g,j} = \Gamma_g \quad (1.78)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g U_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g U_{g,i} U_{g,j} &= -\alpha_g \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P}_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \bar{T}_{g,ij} + F_{ext_{g,i}} + U_{l,i} \Gamma_g \\ &\quad - \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_g \rho u_i'' u_j'' \right\rangle \end{aligned} \quad (1.79)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g Y_{\phi,g} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g Y_{\phi,g} U_{g,j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g D_{\phi,g} \frac{\partial}{\partial x_j} Y_{\phi,g} + \delta_{\phi,F} \Gamma_g \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \left\langle \chi_g \rho y_{\phi}'' u_j'' \right\rangle \end{aligned} \quad (1.80)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g E_{t_g} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g (E_{t_g} + P_g / \rho_g) U_{g,j} &= -\bar{P}_g \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g - \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \bar{Q}_{g,j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \bar{T}_{g,ij} U_{g,i} \\ &\quad + \left( \frac{1}{2} U_{l,i}^2 \right) \Gamma_g + U_{l,i} F_{ext_{g,i}} \\ &\quad + \Lambda_g + \Phi_g - \frac{\partial}{\partial x_j} \left\langle \chi_g \rho_g e_i'' u_j'' \right\rangle \end{aligned} \quad (1.81)$$

Les équations obtenues pour la phase liquide sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_l \rho_l U_{l,j} = \Gamma_l \quad (1.82)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l U_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_l \rho_l U_{l,i} U_{l,j} &= -\alpha_l \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P}_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_l \bar{T}_{l,ij} + F_{ext_{l,i}} + U_{l,i} \Gamma_l \\ &\quad - \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \chi_l \rho u_i'' u_j'' \right\rangle \end{aligned} \quad (1.83)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l H_{s_l} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_l \rho_l U_{l,j} H_{s_l}) = \alpha_l \frac{d\bar{P}_g}{dt} + \Lambda_l + \Phi_l - \frac{\partial}{\partial x_j} \left\langle \chi_l \rho h_s'' u_j'' \right\rangle \quad (1.84)$$

avec :

$$\Gamma_l + \Gamma_g = 0 \quad (1.85)$$

$$F_{ext_l} + F_{ext_g} = 0 \quad (1.86)$$

$$\Lambda_g + \Phi_g + \Lambda_l + \Phi_l = 0 \quad (1.87)$$



## Chapitre 2

# Approche statistique

L'approche volumique du chapitre 1 introduit une échelle spatiale qui peut interférer avec le filtre spatial de la LES. L'approche statistique a l'avantage d'être beaucoup plus générale et a été retenue pour AVBP dans le cadre de la thèse de [Kaufmann \(2004\)](#).

Inspirée de la théorie cinétique des gaz, cette approche consiste à effectuer une moyenne statistique sur un ensemble de particules afin d'aboutir à des équations de milieu continu. De la même façon que l'on obtient les équations de Navier-Stokes à partir d'une équation de type Vlasov-Boltzmann, les équations de la phase dispersée sont obtenues par analogie entre les particules de liquide et les molécules de gaz (Fig. 2.1). La moyenne est calculée sur un ensemble de réalisations de la phase liquide et conditionnée par une réalisation de la phase gazeuse [Février et al. \(2002\)](#). Ce formalisme a été développé par [Simonin \(1996\)](#) qui y a introduit la notion de mouvement décorrélé (Random Uncorrelated Motion ou *RUM*) comme complément de la vitesse d'ensemble (ou vitesse corrélée). Le formalisme présenté ici est le

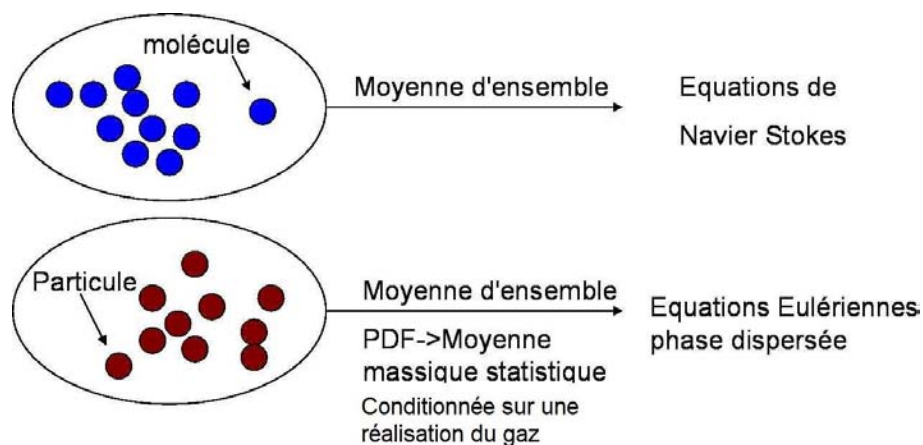


FIG. 2.1 – Principe de l'approche statistique

formalisme utilisé pour les équations implantées dans le code AVBP . On s'interrogera ensuite sur la

validité de cette approche dans le cas des sprays dans les moteurs à piston.

## 2.1 Définitions

Pour obtenir les équations de la phase dispersée, on part de la fonction de densité de probabilité (FDP) à un paramètre (la vitesse) conditionnée par une réalisation de la phase gazeuse  $\mathcal{H}_f$  et on écrit les équations des moments en vitesse.

La fonction de distribution  $f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f)$  est définie de telle sorte que  $f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dx dc_p$  représente, à l'instant  $t$ , le nombre de particules de masse  $m_p$  positionnées entre  $x$  et  $x + dx$  et ayant des vitesses dans l'intervalle  $[c_p; c_p + dc_p]$  pour une réalisation de la phase porteuse. Par souci de simplification, on notera dorénavant la FDP  $f_p(x, c_p, t)$ , le conditionnement par la phase gazeuse n'étant plus rappelé. La masse de la particule  $m_p$  n'apparaît pas dans la FDP car elle n'est pas une variable de l'espace des phases en monodisperse.

On considère des particules (les gouttes) sur lesquelles s'applique une force extérieure  $F$  et on fait l'hypothèse qu'il n'y a pas de collisions. Dans ce cas, pendant un temps  $dt$ , la vitesse  $c_p$  d'une particule devient  $c_p + F/m_p dt$  tandis que sa position  $x$  devient  $x + c_p dt$ . Pendant ce même temps  $dt$  le nombre de molécules considérées n'a pas changé, ce qui signifie que :

$$f_p(x + c_p dt, c_p + \frac{F}{m_p} dt, t + dt, \mathcal{H}_f) dx dc_p - f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dx dc_p = 0 \quad (2.1)$$

S'il y a des collisions, des termes sources apparaissent et perturbent l'équilibre. On note :

$$\Omega_{coll}(f_p) dx dc_p dt = \left( \frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll} dx dc_p dt$$

le terme source dû aux collisions.

L'équation de conservation (2.1) devient alors :

$$f_p(x + c_p dt, c_p + \frac{F}{m_p} dt, t + dt, \mathcal{H}_f) dx dc_p - f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dx dc_p = \Omega_{coll}(f_p) dx dc_p dt \quad (2.2)$$

En divisant l'équation (2.2) par  $dx dc_p dt$  et en faisant tendre  $dt$  vers zéro, on obtient l'équation de Boltzmann classique, qui exprime l'évolution d'une FDP à un seul paramètre :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [c_{p,i} f_p] + \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \frac{F_i}{m_p} f_p = \Omega_{coll}(f_p) \quad (2.3)$$

Les variables  $x$ ,  $c_p$  et  $t$  étant indépendantes,  $c_p$  commute avec  $\frac{\partial}{\partial x_i}$  et  $\frac{\partial}{\partial t}$ . En utilisant la commutation et en intégrant sur l'espace des phases (c'est-à-dire par rapport à  $c_p$ ), on obtient :

$$\int \frac{\partial f_p}{\partial t} dc_p + \int \frac{\partial}{\partial x_i} [c_{p,i} f_p] dc_p = - \int \frac{\partial}{\partial c_i} \left[ \frac{F_i}{m_p} f_p \right] dc_p + \int \left( \frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll} dc_p \quad (2.4)$$

## 2.1 Définitions

Même si l'opérateur de collision est de forme inconnue, on sait que la collision doit conserver la masse, la quantité de mouvement et l'énergie pour des collisions élastiques. On a donc :

$$\mathbb{C}(\iota_k) = \int \iota_k \left( \frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll} dc_p = 0 \quad (2.5)$$

Le terme  $\iota_k$  est appelé l'invariant élémentaire de collision. On en définit cinq :  $\iota_0 = 1$ ,  $\iota_k = c_{p,k}$  avec  $k = 1, 2, 3$  et  $\iota_4 = c_p^2$ .

Dans le cas de collisions inélastiques, la masse est conservée mais ni la quantité de mouvement ni l'énergie cinétique ne le sont. On a donc  $\mathbb{C}(\iota_k) \neq 0$  pour  $k \geq 1$ .

En multipliant (2.3) par  $m_p \Psi_k$ , où  $\Psi_k$  est une fonction dépendant de la vitesse particulaire  $c_p$ , et en intégrant, on obtient l'équation générale :

$$\int \frac{\partial m_p \Psi_k f_p}{\partial t} dc_p + \int \frac{\partial}{\partial x_i} [m_p \Psi_k c_{p,i} f_p] dc_p = - \int \Psi_k \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [F_i f_p] dc_p + \mathbb{C}(m_p \Psi_k) \quad (2.6)$$

Pour obtenir cette équation on fait l'hypothèse que le produit  $\Psi_k f_p$  est intégrable. De plus,  $\Psi_k$  ne dépend pas de l'espace et du temps. Cette hypothèse sera levée par la suite.

$F_i$  dépendant de  $c_p$  à travers la force de traînée, on réécrit le terme  $\int \Psi_k \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [F_i f_p] dc_p$  en :

$$\int \Psi_k \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [F_i f_p] dc_p = \underbrace{\int \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [\Psi_k F_i f_p] dc_p}_{=0} - \int F_i f_p \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [\Psi_k] dc_p \quad (2.7)$$

On suppose que  $\Psi_k f_p$  est fini et tend vers zéro quand une des composantes de la vitesse tend vers l'infini. Le premier terme du membre de droite est donc nul.

Dans le cas des écoulements chargés on considère que les seules forces extérieures qui s'appliquent à une particule sont (Simonin 1996) :

$$F_i = \underbrace{-\frac{m_p}{\rho_l} \frac{\partial}{\partial x_i} P_g}_{\text{Force d'Archimède généralisée}} + \underbrace{F_{D,i}}_{\text{Force de Traînée}} \quad (2.8)$$

La force de traînée projetée sur l'axe  $i$  s'exprime dans sa forme générale par :

$$F_{D,i} = \frac{1}{2} C_D \rho_g S_i |V_r| (U_{g,i} - c_{p,i}) \quad (2.9)$$

où  $|V_r| = \sqrt{(U_{g,i} - c_{p,i})^2}$  est la norme de la vitesse relative entre le gaz et la goutte,  $S_i$  est la surface de la goutte projetée sur le plan perpendiculaire à l'axe  $i$ , appelée aussi surface efficace, et  $U_{g,i}$  est la vitesse du gaz. Pour des gouttes sphériques de diamètre  $d$  et de masse  $m_p$ , la force de traînée s'écrit :

$$F_{D,i} = \frac{1}{2} C_D \rho_g \frac{\pi d^2}{4} |V_r| (U_{g,i} - c_{p,i}) \quad (2.10)$$

d'où

$$\frac{F_{D,i}}{m_p} = \frac{6F_{D,i}}{\rho_l \pi d^3} = \frac{3 \rho_g C_D |V_r| (U_{g,i} - c_{p,i})}{4 \rho_l d} \quad (2.11)$$

Le temps de relaxation de la particule, ou temps caractéristique de Stokes  $\tau_p$  est défini par la formule :

$$\tau_p = \frac{4 \rho_l d}{3 \rho_g C_D |V_r|} \quad (2.12)$$

Le coefficient de traînée  $C_D$  pour une goutte isolée est donné par la corrélation empirique de **Schiller and Nauman (1935)** dans le cas turbulent :

$$C_D = \frac{24}{Re_d} (1 + 0.15 Re_d^{0.687}) \quad (2.13)$$

avec  $Re_d$  le nombre de Reynolds particulaire :

$$Re_d = \frac{\rho_g d |V_r|}{\mu_g} \quad (2.14)$$

où  $\mu_g$  est la viscosité dynamique du gaz. Le temps de relaxation devient donc :

$$\tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18 \mu_g} (1 + 0.15 Re_d^{0.687})^{-1} \quad (2.15)$$

Dans le cas d'une goutte non isolée, par exemple dans un écoulement fortement chargé en gouttelettes, l'écoulement local autour de la goutte est impacté par les gouttes voisines et le coefficient de traînée devient inapproprié. Dans ce cas, il est plus judicieux d'utiliser le coefficient de traînée suivant :

$$C_D = \frac{24}{R_e} (\alpha_g^{-2.65} + 0.15 R_e^{0.687} \alpha_g^{-1.78}) \quad (2.16)$$

Ce coefficient de traînée a par exemple été utilisé par **O'Rourke (1981, Andrews and O'Rourke (1996)** La dépendance du coefficient de traînée à  $\alpha_g$  correspond à ce qui a été révélé expérimentalement par **Richardson and Zaki (1954)**. Dans le cas où  $\alpha_g$  tend vers 1, on retrouve la formulation de **Schiller and Nauman (1935)** pour une goutte isolée. Le temps de relaxation devient :

$$\tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18 \mu_g} (\alpha_g^{-2.65} + 0.15 R_e^{0.687} \alpha_g^{-1.78})^{-1} \quad (2.17)$$

La force de traînée s'exprime alors :

$$F_{D,i} = \frac{m_p}{\tau_p} (U_{g,i} - c_{p,i}) \quad (2.18)$$

On obtient l'équation finale :

## 2.1 Définitions

$$\begin{aligned}
\int \frac{\partial m_p \Psi_k f_p}{\partial t} dc_p + \int \frac{\partial}{\partial x_i} [m_p \Psi_k c_{p,i} f_p] dc_p &= -\frac{m_p}{\rho_l} \frac{\partial}{\partial x_i} P_g \int f_p \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [\Psi_k] dc_p \\
&+ \frac{m_p}{\tau_p} \int (U_{g,i} - c_{p,i}) f_p \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [\Psi_k] dc_p \\
&+ \mathbb{C}(m_p \Psi_k)
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Dans le cas où  $\Psi_k$  dépend de l'espace et du temps, la permutation de l'intégrale avec les dérivées spatiale et temporelle n'est pas directe. Des termes additionnels s'ajoutent et on aboutit à l'équation d'Enskog généralisée :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \int m_p \Psi_k f_p dc_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \int [m_p \Psi_k c_{p,i} f_p] dc_p &= -\frac{m_p}{\rho_l} \frac{\partial}{\partial x_i} P_g \int f_p \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [\Psi_k] dc_p \\
&+ \frac{m_p}{\tau_p} \int (U_{g,i} - c_{p,i}) f_p \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [\Psi_k] dc_p \\
&+ \int \frac{\partial (m_p \Psi_k)}{\partial t} f_p dc_p + \int \frac{\partial (m_p \Psi_k)}{\partial x_i} c_{p,i} f_p dc_p \\
&+ \mathbb{C}(m_p \Psi_k)
\end{aligned} \tag{2.20}$$

On introduit le nombre de particules par unité de volume (ou densité en nombre), défini par :

$$\check{n}_l(x,t) = \int f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dc_p \tag{2.21}$$

En multipliant par  $m_p$  on obtient la masse volumique de la phase dispersée :

$$\check{\alpha}_l \rho_l = m_p \check{n}_l(x,t) = m_p \int f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dc_p = \int m_p f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dc_p \tag{2.22}$$

La relation entre la fraction volumique de liquide  $\check{\alpha}_l$  et la densité en nombre  $\check{n}_l$  est, dans le cadre d'un système diphasique localement monodisperse avec des gouttes de diamètre  $d$  :

$$\check{\alpha}_l = \frac{\check{n}_l \pi d^3}{6} \tag{2.23}$$

La moyenne statistique massique notée ' $\langle \rangle_l$ ', de toute grandeur  $\psi$ , est équivalente, dans le cas monodisperse, à la moyenne statistique notée ' $\check{\gamma}_l$ '. On a donc :

$$\check{\Psi}_{l,i}(x,t) = \langle \Psi_{l,i}(x,t) \rangle_l = \frac{1}{\check{\alpha}_l \rho_l} \int \Psi m_p f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dc_p = \frac{1}{\check{n}_l} \int \Psi f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dc_p \tag{2.24}$$

On parle de monodispersion locale lorsque toutes les gouttes se trouvant en  $(x,t)$  ont le même diamètre, c'est-à-dire que la FDP de distribution de taille de goutte en chaque point et à chaque instant est un Dirac.

Ceci n'empêche pas d'avoir une polydispersion globale, c'est-à-dire une distribution spatiale de diamètre moyen, qui varie avec le temps. Cependant, il y a une perte d'information, puisque des gouttes de taille différente ont un comportement inertiel différent, remplacé ici par un comportement moyen.

## 2.2 Formalisme mésoscopique

On rappelle ici le principe du formalisme mésoscopique ainsi que l'obtention des équations de la phase dispersée pour un système monodisperse. Des informations complémentaires sont fournies dans les thèses de Kaufmann (2004), Mossa (2005) et Riber (2007).

Le formalisme mésoscopique permet la distinction entre la vitesse d'une particule et la vitesse d'ensemble d'un nuage de particules. Dans le cas où l'on néglige les interactions entre gouttes la seule source de corrélation de vitesse entre les gouttes (en dehors des vitesses initiales) est la traînée car les gouttes tendent à adopter la vitesse du gaz.

La vitesse mésoscopique est la vitesse locale instantanée moyenne des particules :

$$\check{U}_{l,i}(x,t) = \frac{1}{\check{n}_l(x,t)} \int c_{p,i} f_p(x, c_p, t, \mathcal{H}_f) dc_p \quad (2.25)$$

Chaque particule  $k$  située en  $x_i^{(k)}(t)$  à l'instant  $t$  possède une vitesse instantanée Lagrangienne  $u_{p,i}^{(k)}(t)$ . On peut décomposer cette vitesse en une composante moyenne de l'ensemble des particules et une composante dite décorrélée  $\delta u_{p,i}^k$  propre à la particule :

$$u_{p,i}^{(k)}(t) = \check{U}_{l,i}(x_i^{(k)}(t), t) + \delta u_{p,i}^k(t) \quad (2.26)$$

Il est utile de rappeler (Kaufmann 2004) que la vitesse mésoscopique  $\check{U}_{l,i}$  est la vitesse eulérienne moyenne de l'ensemble des réalisations alors que la vitesse décorrélée est une vitesse Lagrangienne propre à la particule pour une réalisation (Fig. 2.2) :

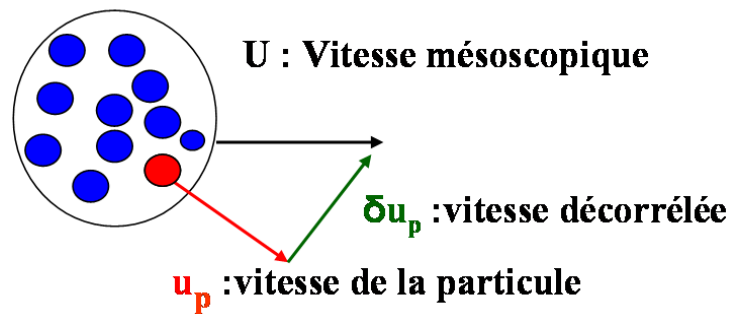


FIG. 2.2 – Présentation de la vitesse mésoscopique (ou vitesse moyenne ou corrélée) et de la vitesse décorrélée en comparaison avec la vitesse particulaire

Par analogie avec la théorie cinétique, la moyenne d'ensemble du tenseur de corrélation des vitesses résiduelles ( $RUV$  pour Random Uncorrelated Velocity) est noté :

$$\delta\check{R}_{l,ij}(x,t) = \frac{1}{\check{n}_l} \int (c_{p,i} - \check{U}_{l,i}) (c_{p,j} - \check{U}_{l,j}) f_p dc_p \quad (2.27)$$

L'énergie du mouvement décorrélé  $\delta\check{\theta}_l$  est définie comme la moitié de la trace du tenseur RUV, soit :

$$\delta\check{\theta}_l = \frac{1}{2} \delta\check{R}_{l,ii} \quad (2.28)$$

Le tenseur triple de vitesse décorrélée  $\check{K}_{l,ijk}$  est noté :

$$\delta\check{K}_{l,ijk}(x,t) = \frac{1}{\check{n}_l} \int (c_{p,i} - \check{U}_{l,i}) (c_{p,j} - \check{U}_{l,j}) (c_{p,k} - \check{U}_{l,k}) f_p dc_p \quad (2.29)$$

### 2.3 Les équations de la phase dispersée

Partant de l'équation générale (2.20), on écrit les équations des moments pour toutes les grandeurs en choisissant des valeurs adéquates pour  $\psi_k$  :  $\frac{1}{\check{m}_p}$  ;  $1$  ;  $c_{p,i}$  ;  $\frac{1}{2}m_p\delta u_{p,j}\delta u_{p,j}$  et  $h_p$ . On obtient respectivement les équations sur la densité en nombre de particules, la fraction volumique, la quantité de mouvement, l'énergie décorrélée et l'enthalpie.

Les équations de conservation s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{n}_l \check{U}_{l,i} = 0 \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{U}_{l,i} = \Gamma_l \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l \rho_l \check{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{\alpha}_l \rho_l \check{U}_{l,i} \check{U}_{l,j} &= \check{U}_{l,i} \Gamma_l - \check{\alpha}_l \frac{\partial}{\partial x_i} P_g + \frac{\check{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\bar{U}_{g,i} - \check{U}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{R}_{l,ij} \\ &+ \mathbb{C}(m_p c_{p,i}) \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l \rho_l \delta\check{\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{\alpha}_l \rho_l \delta\check{\theta}_l \check{U}_{l,i} &= \delta\check{\theta}_l \Gamma_l - 2 \frac{\check{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} \delta\check{\theta}_l - \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \check{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{\alpha}_l \rho_l \delta\check{K}_{l,ij} \\ &+ \mathbb{C}(\frac{1}{2} m_p \delta u_{p,j} \delta u_{p,j}) \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l \rho_l \check{H}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{\alpha}_l \rho_l \check{H}_l \check{U}_{l,i} = \mathbb{T}(h''_l) + \Pi_l + \mathbb{C}(\frac{1}{2} m_p h_p) \quad (2.34)$$

Les termes d'évaporation  $\Gamma_l$  et  $\Pi_l$  apparaissent dans le cas d'une variation de masse et leur modélisation est présentée en fin de chapitre.

Dans le calcul de la traînée,  $\bar{U}_g$  est considéré comme constant puisque les statistiques sont conditionnées à une seule réalisation de l'écoulement gazeux.

Le terme  $\mathbb{T}(h''_l)$  représente la diffusion d'enthalpie par le mouvement décorrélé. Ce terme est négligeable comparé au terme d'échange d'enthalpie entre les phases  $\Pi_l$ . Dans le cas d'un spray dans une chambre de combustion dans laquelle les températures sont très élevées, cette hypothèse reste parfaitement valide.

### 2.3.1 Équations 'standard' simplifiées d'AVBP

Les équations codées dans AVBP au début de cette thèse, appelées équations 'standards', ne sont pas exactement les équations présentées ci-dessus. Plusieurs hypothèses supplémentaires ont été faites dans les travaux de référence (Kaufmann 2004; Riber 2007) pour des d'écoulements dilués. Elles sont résumées ici :

**H1** - Le rapport de densité entre le liquide et le gaz permet de ne prendre en compte que la force de traînée.

**H2** - La phase dispersée est diluée (la fraction volumique de liquide  $\check{\alpha}_l < 0.01$ ) et la fraction volumique de gaz est  $1 - \check{\alpha}_l \equiv 1$ .

**H3** - Les interactions gouttes-gouttes sont négligeables.

Les aspects collisionnels sont donc négligés. Dans le cas de l'application à l'injection directe, une modélisation des termes collisionnels  $\mathbb{C}(\frac{1}{2}m_p\delta u_{p,j}\delta u_{p,j})$  et  $\mathbb{C}(m_p c_{p,i})$  est nécessaire et développée au chapitre 4. La seule force à prendre en compte étant la force de traînée, le terme  $-\check{\alpha}_l \frac{\partial}{\partial x_i} P_g$  est lui aussi négligé.

Les équations simplifiées obtenues en utilisant ces hypothèses sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{n}_l \check{U}_{l,i} = 0 \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{U}_{l,i} = \Gamma_l \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l \rho_l \check{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{\alpha}_l \rho_l \check{U}_{l,i} \check{U}_{l,j} = \Gamma_l \check{U}_{l,i} + \frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} (U_{g,i} - \check{U}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{p,ij} \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l \rho_l \delta \check{\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{\alpha}_l \rho_l \delta \check{\theta}_l \check{U}_{l,i} = \delta \check{\theta}_p \Gamma_l - 2 \frac{\check{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} \delta \check{\theta}_l - \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \check{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{\alpha}_l \rho_l \delta \check{K}_{l,ij} \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l \rho_l \check{H}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{\alpha}_l \rho_l \check{H}_l \check{U}_{l,i} = \Pi_l \quad (2.39)$$

Les terms  $\delta \check{R}_{p,ij}$  et  $\delta \check{K}_{l,ij}$  doivent être fermés (cf section 2.4.1).

### 2.3.2 Équations 'standards' filtrées

Les équations 'standard' précédentes sont filtrées dans le cadre de la LES. Une variable filtrée est obtenue à partir d'une variable non filtrée par produit de convolution avec un filtre spatial de noyau  $G_{\Delta_f}$  de taille caractéristique  $\Delta_f$  :

$$\bar{f}(x) = \int f(x') G_{\Delta_f}(x' - x) dx' \quad (2.40)$$



### 2.3 Les équations de la phase dispersée

De la même manière que l'on définit une moyenne de Favre pour le gaz, on définit une moyenne de Favre pondérée par la densité en nombre pour la phase dispersée :

$$\bar{n}_l \widehat{f}(x) = \int \check{n}_l \check{f}(x) G_{\Delta_f}(x' - x) dx' \quad (2.41)$$

Ce filtre pondéré par la densité de particules est lié au filtre pondéré par la fraction volumique de liquide par :

$$\bar{n}_l \widehat{f} = \overline{\check{n}_l \check{f}} = \frac{6\bar{\alpha}_l}{d^3\pi} \check{f} \quad (2.42)$$

Sous l'hypothèse de spray monodisperse à une échelle inférieure à la taille du filtre, les deux filtres sont équivalents.

Les équations filtrées sont finalement :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{n}_l \widehat{U}_{l,i} = 0 \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}_l \bar{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho}_l \bar{\alpha}_l \widehat{U}_{l,i} = \Gamma_l \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{U}_{l,i} \widehat{U}_{l,j} = \widehat{U}_{l,i} \Gamma_l - \bar{\alpha}_l \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P}_g + \frac{\bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l}{\tau_p} (\widehat{U}_{g,i} - \widehat{U}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta R}_{l,ij} - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{l,ij} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta \theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta \theta}_l \widehat{U}_{l,i} &= \widehat{\delta \theta}_l \Gamma_l - 2 \frac{\bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l}{\tau_p} \widehat{\delta \theta}_l - \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta K}_{l,ij} \\ &+ \Pi_{\delta \theta_l} - \frac{\partial}{\partial x_j} Q_{l,j} \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{H}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{H}_l \widehat{U}_{l,i} = \Pi_l \quad (2.47)$$

Les termes de sous-maille sont :

- Le tenseur de contrainte de sous-maille pour la phase dispersée  $T_{l,ij} = \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l (\widehat{U}_{l,i} \widehat{U}_{l,j} - \widehat{U}_{l,i} \widehat{U}_{l,j})$
- La production de sous maille de mouvement décorrélé  $\Pi_{\delta \theta_l} = \left( \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} - \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} \right)$
- Le terme de diffusion de sous maille de mouvement décorrélé :  $Q_{l,j} = \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l (\widehat{U}_{l,i} \widehat{\delta \theta}_l - \widehat{U}_{l,i} \widehat{\delta \theta}_l)$

On néglige la diffusion de sous-maille de l'enthalpie, le terme d'échange d'enthalpie par évaporation étant prépondérant.

## 2.4 Modélisation 'standard' utilisée pour la phase dispersée

### 2.4.1 Modélisation des termes décorrélés

Les termes associés au mouvement décorréolé sont modélisés par une hypothèse d'équilibre (Kaufmann 2004), équivalente à une hypothèse de Boussinesq. On suppose que la modélisation reste valable pour les termes filtrés :

$$\widehat{\delta R}_{l,ij} = \frac{2}{3} \widehat{\delta \theta}_l \delta_{ij} - 2 \widehat{\nu}_{RUV} \left( \widehat{S}_{l,ij} - \frac{\widehat{S}_{l,mm} \delta_{ij}}{3} \right) = \frac{2}{3} \widehat{\delta \theta}_l \delta_{ij} - 2 \widehat{\nu}_{RUV} \widehat{S}_{l,ij}^* \quad (2.48)$$

$$\widehat{\delta K}_{l,ij} = -\widehat{\kappa}_{RUV} \frac{\partial \widehat{\delta \theta}_l}{\partial x_j} \quad (2.49)$$

où  $\widehat{S}_{l,ij}$  est le tenseur filtré des déformations du champ des particules :

$$\widehat{S}_{l,ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \widehat{U}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{U}_{l,j}}{\partial x_i} \right) \quad (2.50)$$

La viscosité  $\widehat{\nu}_{RUV}$  et le coefficient de diffusion  $\widehat{\kappa}_{RUV}$  valent :

$$\widehat{\nu}_{RUV} = \frac{\tau_p}{3} \widehat{\delta \theta}_l \quad (2.51)$$

$$\widehat{\kappa}_{RUV} = \frac{10}{27} \tau_p \widehat{\delta \theta}_l \quad (2.52)$$

Ces modèles ont été testés *a priori* par Moreau (2006) à partir de DNS et le modèle a été validé pour  $\widehat{\delta R}_{l,ij}$ . Un effort doit être néanmoins encore porté sur la modélisation des termes de diffusion qui n'est pas encore satisfaisante.

### 2.4.2 Modélisation des termes de sous-maille

Moreau et al. (2005, Moreau (2006), Riber et al. (2005) et Riber (2007) ont proposé et testé un modèle pour le tenseur de sous maille pour la phase dispersée  $T_{l,ij}$ . Étant donné la forte compressibilité de la phase dispersée, le modèle de Smagorinsky compressible (Smagorinsky 1963) est utilisé et couplé avec un modèle de Yoshizawa (1986) pour l'énergie de sous-maille. Si on note  $\widehat{S}_l$  le tenseur filtré des déformations du champ des particules et tel que  $|\widehat{S}_l|^2 = 2S_{l,ij}S_{l,ij}$ , on a :

$$T_{l,ij} = -C_s 2 \Delta_f^2 \bar{\alpha}_l \rho_l |\widehat{S}_l| \left( \widehat{S}_{l,ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \widehat{S}_{l,kk} \right) + C_l 2 \Delta_f^2 \bar{\alpha}_l \rho_l |\widehat{S}_l|^2 \delta_{ij} \quad (2.53)$$

Les tests *a priori* de Moreau et al. (2005) ont permis d'obtenir les valeurs suivantes des constantes :  $C_s = 0.02$  et  $C_l = 0.012$

## 2.4 Modélisation 'standard' utilisée pour la phase dispersée

Pour les termes de sous-maille relatifs au mouvement décorrélé, le terme de diffusion  $Q_{l,j}$  n'est pas modélisé ici, sa modélisation posant certaines difficultés (Moreau 2006; Riber 2007). Le terme de production de sous-maille de RUE filtré  $\Pi_{\delta\theta_l}$  est obtenu (Riber et al. 2006; Riber 2007) en faisant une hypothèse d'équilibre sur l'énergie corrélée de sous-maille et en négligeant les termes de diffusion ainsi que la force de traînée. Ainsi toute l'énergie de sous maille produite par le mouvement corrélé est intégralement transférée en énergie décorrélée :

$$\Pi_{\delta\theta_l} \approx -T_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} \quad (2.54)$$

### 2.4.3 Modélisation des termes d'échanges

Le taux d'évaporation  $\Gamma_l$  s'exprime par le taux Lagrangien de variation de masse  $\dot{m}_p = \frac{dm_p}{dt}$  :

$$\Gamma_l = -\dot{n}_l \langle \dot{m}_p \rangle_l \quad (2.55)$$

Le modèle d'évaporation utilisé est un modèle hydrodynamique, écrit sous l'hypothèse de goutte isolée dans un milieu gazeux sans combustion et de température de la goutte uniforme (Spalding 1953; Abramzon and Sirignano 1989) (hypothèse d'une conductivité thermique infinie). L'interface liquide/gaz est supposé en état d'équilibre thermodynamique, ce qui permet d'utiliser la relation de Clausius-Clapeyron :

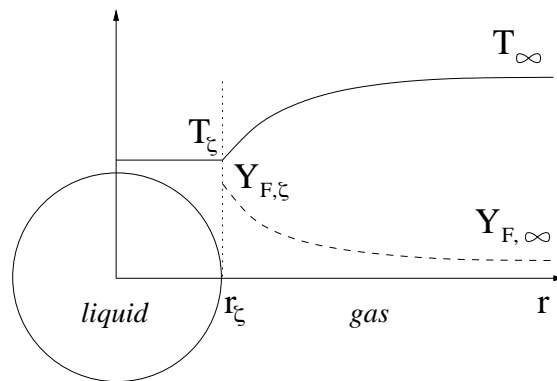


FIG. 2.3 – Goutte isolée à la température  $T_\xi$  s'évaporant dans un écoulement de gaz à la température  $T_\infty$  et avec une fraction massique de carburant  $Y_{F,\infty}$ .

La température de la goutte est calculée par l'équation de l'enthalpie de la phase liquide qui prend bien en compte les phases de réchauffement et d'évaporation.

### Transfert massique

Le taux de transfert de masse  $\dot{m}_p$  dans Eq. 2.55 dépend seulement des variables à  $r = r_\zeta$  et  $r \rightarrow \infty$  (Kuo 1986) :

$$\dot{m}_p = -\pi d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \quad (2.56)$$

$Sh$  est le nombre de Sherwood donné par :

$$Sh = 2 + KRe_p^{1/2} Sc_F^{1/3} \quad (2.57)$$

où le terme  $KRe_p^{1/2} Sc_F^{1/3}$  prend en compte les effets convectifs liés à la vitesse relative entre les phases. Dans la littérature,  $K$  varie entre 0.552 et 0.6 (Ranz and Marshall 1952). Dans AVBP la valeur  $K = 0.55$  a été retenue.

Le produit  $[\rho D_F]$  est obtenu à partir du nombre de Schmidt du carburant  $Sc_F$  :

$$[\rho D_F] = \frac{\mu}{Sc_F} \quad (2.58)$$

$B_M$  est le nombre de Spalding de masse lié à la différence de fraction massique de carburant (indice  $F$ ) entre l'interface et l'infini :

$$c p E B_M = \frac{Y_{F,\zeta} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\zeta}} \quad (2.59)$$

où  $Y_{F,\zeta}$  peut être écrit en fonction de la fraction molaire  $X_{F,\zeta}$  :

$$Y_{F,\zeta} = \frac{X_{F,\zeta} W_F}{X_{F,\zeta} W_F + (1 - X_{F,\zeta}) \bar{W}_{nF,\zeta}} \quad (2.60)$$

où  $\bar{W}_{nF,\zeta}$  est la masse molaire moyenne du *pseudo*-mélange constitué de toutes les espèces sauf le carburant. En faisant l'hypothèse que la composition de ce mélange n'évolue pas entre  $\zeta$  et  $\infty$ , on obtient :

$$\bar{W}_{nF,\zeta} = \bar{W}_{nF,\infty} = \frac{1 - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\infty} \frac{W}{W_F}} W \quad (2.61)$$

où  $X_{F,\zeta}$  est donnée par la loi de Raoult pour un mélange idéal de gaz parfaits :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{F,\zeta}}{P} \quad (2.62)$$

où  $P_{F,\zeta}$  est la pression partielle de carburant gazeux à l'interface donnée par la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{F,\zeta} = P_{cc} \exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\zeta}\right)\right) \quad (2.63)$$

$P_{cc}$  et  $T_{cc}$  sont respectivement la pression et la température de référence correspondant à un point sur la courbe de saturation du carburant.  $L_v$  est la chaleur latente massique d'évaporation représentant la différence d'enthalpie entre les phases à la température de référence  $T_{ref}$  :

$$L_v = \Delta h_{s,F}(T_{ref}) = h_{s,F}(T_{ref}) - h_{s,p}(T_{ref}) \quad (2.64)$$

Dans Eq. 2.63, la température de l'interface  $T_\zeta$  a été supposée égale à la température de la goutte :  $T_\zeta = T_p$ . Dans Eq. 2.59 et 2.61, la condition à l'infini correspond à l'état thermodynamique du gaz non perturbé par la goutte. Pour des écoulements dilués, la distance entre les gouttes est suffisamment grande pour garantir que les gouttes n'interagissent pas entre elles. En conséquence l'état infini ( $\infty$ ) correspond aux valeurs moyennes locales Eulériennes du gaz dans la cellule.

### Échange de chaleur

Le flux conductif de gaz à l'interface est approché par l'expression obtenue pour une particule sans changement de phase :

$$\phi_g^c = \pi d Nu \lambda (T_\zeta - T_\infty) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (2.65)$$

où

$$B_T = \frac{\overline{C_p} (T_\zeta - T_\infty)}{\Delta h_{s,F} (T_\zeta) + \phi_l^c / \dot{m}_p} \quad (2.66)$$

est le nombre de Spalding de température et est évalué par  $B_T = \max\{\varepsilon, (1 + B_M)^{Sh/(NuLe_F)} - 1\}$ , où  $\varepsilon$  est un petit nombre utilisé pour éviter les erreurs numériques quand  $B_T$  tend vers 0 dans Eq. 2.65.  $\phi_l^c$  est le flux conductif entrant dans la goutte.  $Nu$  est le nombre de Nusselt exprimé de manière similaire au nombre de Sherwood (Eq. 2.57) :

$$Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.67)$$

La conductivité thermique du gaz  $\lambda$  est obtenue à partir du nombre de Prandtl  $Pr$  :

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr} \quad (2.68)$$

Le bilan d'énergie à l'interface s'écrit :

$$\phi_l^t + \phi_g^t = 0 \quad (2.69)$$

où  $\phi_k^t$  est le flux thermique total pour la phase k.  $\phi_k^t = \phi_k^{ev} + \phi_k^c$  avec  $\phi_k^{ev}$  le flux associé à l'évaporation. On a donc :

$$\phi_l^{ev} + \phi_l^c + \phi_g^{ev} + \phi_g^c = 0 \quad (2.70)$$

$$\text{avec : } \phi_l^{ev} = \dot{m}_p h_{s,p}(T_\zeta) \quad \text{et} \quad \phi_g^{ev} = -\dot{m}_p h_{s,F}(T_\zeta) \quad (2.71)$$

La somme des flux de chaleur associés au transfert de masse vaut donc :

$$\phi^{ev} = -\dot{m}_p \Delta h_{s,F} (T_\zeta) = -\phi_g^c - \phi_l^c \quad (2.72)$$

Cette relation permet de déterminer le flux inconnu  $\phi_l^c = -\phi^{ev} - \phi_g^c$ .

De manière similaire au taux de transfert de masse par évaporation, les taux de variation d'énergie sont obtenus dans le spray à partir des expressions pour une goutte isolée en prenant la moyenne statistique :

$$\Lambda = \check{n}_l \langle \phi_g^{ev} \rangle_l = \Gamma_l h_{s,F} (\check{T}_l) \quad (2.73)$$

$$\Lambda_l = \check{n}_l \langle \phi_l^{ev} \rangle_l = -\Gamma_l (\check{h}_l + h_{s,corr}) \quad (2.74)$$

$$\Phi = \check{n}_l \langle \phi_g^c \rangle_l \quad (2.75)$$

$$\Phi_l = \check{n}_l \langle \phi_l^c \rangle_l = -\Gamma_l \Delta h_{s,F} (\check{T}_l) - \Phi \quad (2.76)$$

La signification de  $h_{s,corr}$  in Eq. 2.74 est détaillé à la fin de la section.

Les taux de variation d'énergie sont alors obtenus pour les deux phases :

Taux de variation d'énergie	<i>pour le gaz</i>	<i>pour le liquide</i>
Par changement de phase :	$\Lambda$	$\Lambda_l$
Par conduction thermique :	$\Phi$	$\Phi_l$
Total :	$\Pi = \Lambda + \Phi$	$\Pi_l = \Lambda_l + \Phi_l$

Tout comme pour une seule goutte, le bilan d'enthalpie à l'interface dans le spray s'écrit :

$$\Pi + \Pi_l = \Lambda + \Phi + \Lambda_l + \Phi_l = 0 \quad (2.77)$$

On retrouve bien le bilan énergétique obtenu au chapitre 1.

### Coefficient de transport : la règle des 2/3

Dans Eq. 2.56 et 2.65, les propriétés de transport  $[\rho D_F]$  et  $\lambda$  sont supposées constantes dans l'intégration des équations de conservation. En réalité, ces propriétés varient à cause des variations de composition et de température entre  $r_\zeta$  et l'infini. Cette variation peut être prise en compte si les valeurs de référence sont judicieusement choisies :

$$T_{ref} = (1 - a) T_\zeta + a T_\infty \quad (2.78)$$

$$Y_{k,ref} = (1 - a) Y_{k,\zeta} + a Y_{k,\infty} \quad (2.79)$$

où  $a = 1/3$  (Hubbard, Denny, and Mills 1975; Versaevel 1996).

### Traitement numérique de l'ébullition

Le nombre de Spalding de masse (Eq. 2.59) présente une singularité quand  $Y_{F,\zeta} = 1$ . Cette valeur est atteinte quand la température à l'interface atteint la température d'ébullition à la pression considérée  $T_b(P)$  donnée par la relation de Clausius-Clapeyron (Eq. 2.63) :

## 2.5 Quelques points d'interrogation sur l'approche mésoscopique

---

$$T_b = \left( \frac{1}{T_{cc}} - \frac{\mathcal{R}}{W_F L_v} \ln \left( \frac{P}{P_{cc}} \right) \right)^{-1} \quad (2.80)$$

Analytiquement la loi d'évaporation (Eq. 2.56) ne permet pas d'atteindre la température d'ébullition puisque le flux de chaleur pour le liquide devient nul juste avant. Numériquement, le manque de résolution spatiale ou temporelle peut conduire à des températures supérieures à  $T_b$ . Dans ce cas, la température de liquide est fixée à la température d'ébullition et le flux conductif de liquide est fixé à zéro. A partir de Eq. 2.72, le taux d'évaporation est alors :

$$\dot{m}_p(T_\zeta = T_b) = \frac{\phi_g^c}{\Delta h_{s,F}(T_b)} \quad (2.81)$$

### Valeur de référence pour l'enthalpie liquide

L'enthalpie liquide  $h_{s,p}(T_\zeta)$  est définie à partir d'une valeur de référence différente de celle utilisée pour l'enthalpie du gaz  $h_{s,F}(T_\zeta)$ . Il faut donc ajouter un terme additionnel dans l'expression du flux d'enthalpie de la phase liquide :  $+\dot{m}_p h_{s,corr}$  avec  $h_{s,corr} = h_{s,F}(T_{l,ref}) - L_v$ .

## 2.5 Quelques points d'interrogation sur l'approche mésoscopique

### 2.5.1 Validité du conditionnement sur la réalisation gazeuse

Nous avons vu que la moyenne d'ensemble était conditionnée par une réalisation de la phase gazeuse. Cette hypothèse n'est valide que dans le cas où la phase dispersée n'influe pas ou très peu sur la phase gazeuse. Dans le cas d'un spray Diesel où l'essentiel de la turbulence dans la chambre de combustion est généré par l'injection, cette hypothèse est donc discutable. On ne peut donc plus considérer que la vitesse de gaz est constante quelle que soit la réalisation. Or la vitesse de gaz intervient dans la force de traînée, il faudrait théoriquement prendre en compte une fluctuation par rapport à la moyenne statistique. Ici l'hypothèse qui est faite est que les statistiques de la phase gazeuse changent peu avec les réalisations de l'écoulement liquide.

### 2.5.2 Notion d'échelle et remise en cause de l'hypothèse de viscosité

Les équations de la phase dispersée obtenues par moyenne d'ensemble ont l'avantage de ne pas introduire de notion d'échelle de longueur. Ces équations sont donc valables à toute échelle.

Elles sont cependant limitées au cas où l'approximation des milieux continus est valide. Les échelles caractéristiques de la phase dispersée ne sont pas du même ordre de grandeur que pour un gaz. Les molécules ont une taille de l'ordre de l'Angström alors que les gouttes ont une taille de l'ordre du

micromètre. La validité de l'hypothèse des milieux continus et *a fortiori* le modèle de viscosité pour le tenseur RUV (Eq. 4.34) n'est donc pas évidente pour la phase dispersée. Pour évaluer cette limite de validité, il est intéressant de calculer un nombre de Knudsen pour la phase dispersée. L'approche continue est justifiée pour un nombre de Knudsen inférieur à 1. Le nombre de Knudsen peut être défini par le rapport entre le libre parcours moyen  $l_\delta$  et la plus petite échelle du champ de vitesse mésoscopique  $l_m$ . On peut évaluer le libre parcours moyen  $l_\delta$  à l'aide de l'énergie décorrélée et du temps de relaxation  $\tau_p$  des particules comme proposé par Moreau (2006) :

$$l_\delta = \sqrt{\frac{2}{3}} \delta\theta_l \tau_p \quad (2.82)$$

La plus petite échelle du champ de vitesse mésoscopique peut être obtenue par l'intermédiaire de l'énergie cinétique mésoscopique notée  $\tilde{q}_l^2$  avec la formule :

$$l_m = \frac{\sqrt{\frac{2}{3}} \tilde{q}_l^2}{|S_l|} \quad (2.83)$$

avec  $|S_l|^2 = 2S_{l,ij}S_{l,ij}$  où  $S_{l,ij}$  est le tenseur de déformation du champ de vitesse des particules.

Ceci permet de calculer un nombre de Knudsen relatif à la plus petite échelle du champ de vitesse mésoscopique :

$$K_n = \sqrt{\frac{\delta\theta_l}{\tilde{q}_l^2}} \tau_p |S_l| \quad (2.84)$$

Comme le signale Moreau (2006), le nombre de Knudsen est souvent trop élevé pour valider pleinement l'hypothèse de viscosité. Néanmoins, ce modèle donne de bons résultats si on se réfère aux tests *a priori* (Moreau 2006) et *a posteriori* (Kaufmann, Moreau, Simonin, and Helie 2006).

### 2.5.3 Remarque sur le sens de l'opérateur statistique

Il est parfois intéressant de rappeler que cette statistique est différente d'une approche de type *RANS* puisqu'elle consiste à appliquer une moyenne d'ensemble non pas sur les équations de Navier-Stokes comme en *RANS* mais directement sur l'équation de Boltzmann de transport de la FDP.

## 2.6 Equations du gaz filtrées

On rappelle ici les équations filtrées pour la phase gazeuse. De la même façon que pour les équations du liquide, les équations du gaz sont filtrées spatialement avec un noyau  $G_{\Delta_f}$  de taille caractéristique  $\Delta_f$ . Dans la littérature, plusieurs auteurs proposent une dérivation des équations filtrées (Sirignano 2005; Carrara and DesJardin 2006) .



## 2.6 Equations du gaz filtrées

Comme pour le liquide, la quantité  $f$  filtrée s'écrit :

$$\bar{f}(x) = \int f(x') G_{\Delta_f}(x' - x) dx' \quad (2.85)$$

La moyenne de Favre  $\tilde{f}(x)$  est habituellement utilisée pour s'affranchir des fluctuations de densité, elle est écrite ici à l'aide de la fraction volumique de gaz sous la forme :

$$\overline{\alpha_g \rho_g \tilde{f}(x)} = \int \alpha_g \rho_g f(x') G_{\Delta_f}(x' - x) dx' \quad (2.86)$$

où  $\overline{\alpha_g \rho_g}$  est la densité filtrée rapportée au volume occupé par le gaz.

On obtient alors les équations suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\alpha_g \rho_g} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{U}_g} = \overline{\Gamma_g} = -\overline{\Gamma_l} \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{U}_{g,i}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{U}_{g,i} \tilde{U}_{g,j}} = -\overline{\alpha_g \frac{\partial}{\partial x_i} P_g} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{g,i,j}} + \overline{\tau_{g,i,j}^t}) - \frac{\overline{\alpha_l \rho_l}}{\tau_p} (\overline{U_{g,i} - U_{l,i}}) + \overline{U_{l,i} \Gamma} \quad (2.88)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{E}_g} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{U}_{g,j} \tilde{E}_g} &= -P_g \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \overline{U_{l,i} F_{drag}} - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{U_{g,i} (P \delta_{i,j} - \tau_{g,i,j})} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{q_{g,j}} + \overline{q_{g,j}^t}) \\ &+ \overline{\Lambda_g} + \overline{\Phi_g} + \left( \frac{1}{2} \overline{U_{l,i}^2} \right) \Gamma \end{aligned} \quad (2.89)$$

Le tenseur visqueux laminaire filtré s'écrit :

$$\overline{\tau_{g,i,j}} = -\overline{\alpha_g \rho_g} \left( \overline{U_{g,i} U_{g,j}} - \tilde{U}_{g,i} \tilde{U}_{g,j} \right) \quad (2.90)$$

Les termes de sous-maille notés "t" font intervenir la fraction volumique de gaz puisqu'ils s'écrivent :

$$\overline{\tau_{g,i,j}^t} = -\overline{\alpha_g \rho_g} \left( \overline{U_{g,i} U_{g,j}} - \tilde{U}_{g,i} \tilde{U}_{g,j} \right) \quad (2.91)$$

$$\overline{q_{g,j}^t} = -\overline{\alpha_g \rho_g} \left( \overline{U_{g,i} E_g} - \tilde{U}_{g,i} \tilde{E}_g \right) \quad (2.92)$$

## 2.7 Bilan des équations par approche statistique

Les équations obtenues pour la phase gazeuse sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\alpha_g \rho_g} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{U}_g} = \overline{\Gamma_g} = -\overline{\Gamma_l} \quad (2.93)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{U}_{g,i}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{U}_{g,i} \tilde{U}_{g,j}} = -\overline{\alpha_g \frac{\partial}{\partial x_i} P_g} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{g,i,j}} + \overline{\tau_{g,i,j}^t}) - \frac{\overline{\alpha_l \rho_l}}{\tau_p} (\overline{U_{g,i} - U_{l,i}}) + \overline{U_{l,i} \Gamma} \quad (2.94)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{E}_g} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\alpha_g \rho_g \tilde{U}_{g,j} \tilde{E}_g} &= -\overline{P_g \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}} + \overline{U_{l,i} F_{drag}} - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{U_{g,i} (P \delta_{i,j} - \tau_{g,i,j})} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{q_{g,j}} + \overline{q_{g,j}^t}) \\ &+ \overline{\Lambda_g} + \overline{\Phi_g} + \left( \frac{1}{2} \overline{U_{l,i}^2} \right) \overline{\Gamma} \end{aligned} \quad (2.95)$$

Les équations obtenues pour la phase liquide sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{n}_l \hat{U}_{l,i} = 0 \quad (2.96)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \bar{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{U}_{l,i} = \Gamma_l \quad (2.97)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \hat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \hat{U}_{l,i} \hat{U}_{l,j} = \hat{U}_{l,i} \Gamma_l - \bar{\alpha}_l \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P}_g + \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\hat{U}_{g,i} - \hat{U}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta R_{l,ij}} - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{l,ij} \quad (2.98)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta \theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta \theta}_l \hat{U}_{l,i} &= \widehat{\delta \theta}_l \Gamma_l - 2 \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} \widehat{\delta \theta}_l - \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta R_{l,ij}} \frac{\partial}{\partial x_j} \hat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta K_{l,ij}} \\ &+ \Pi_{\delta \theta_l} - \frac{\partial}{\partial x_j} Q_{l,j} \end{aligned} \quad (2.99)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \hat{H}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \rho_l \hat{H}_l \hat{U}_{l,i} = \Pi_l \quad (2.100)$$

## Chapitre 3

# Conclusions sur les équations diphasiques bi-fluides

Dans les deux chapitres précédents les équations du système diphasique ont été obtenues par moyenne volumique ainsi que par le formalisme mésoscopique. Même si ces équations présentent de fortes similitudes, il faut néanmoins rappeler que les hypothèses utilisées pour les obtenir sont nettement différentes.

Ainsi pour la moyenne volumique, la notion d'échelle est explicite puisqu'elle intervient par l'intermédiaire du volume de contrôle. Le terme de fluctuation  $\langle \chi_g \rho u_i'' u_j'' \rangle$  dans l'équation de quantité de mouvement représente donc une fluctuation à une échelle inférieure à la taille du volume de contrôle. Il contient donc à la fois une contribution du mouvement corrélé ainsi que du mouvement décorrélé. Dans le formalisme mésoscopique, la moyenne d'ensemble n'impose pas d'échelle. Le tenseur des vitesses décorrélées  $\delta \check{R}_{p,ij}$  ne contient que la contribution décorrélée et ce à toutes les échelles. Bien sûr, l'application d'un filtre LES implique à nouveau une notion d'échelle même avec le mouvement décorrélé. C'est pourquoi des termes de sous-maille apparaissent. L'avantage de l'approche mésoscopique est de séparer clairement le mouvement mésoscopique, le mouvement décorrélé et le mouvement de sous-maille. Concrètement cette séparation et la modélisation de l'énergie décorrélée est particulièrement intéressante dans le cas des écoulements chargés dans lesquels les gouttes sont susceptibles de se rencontrer. La modélisation de cette rencontre ne peut se faire que si l'on prend en compte une 'agitation' des gouttes dans un nuage. Cette décorrélation pourrait être calculée en transportant différents moments en vitesse comme pour une approche de type DQMOM. L'approche choisie ici avec un terme d'énergie permet de limiter le temps de calcul et a montré de bons résultats en THI (Riber 2007; Moreau 2006). Il reste néanmoins à adapter cette approche pour les injections dans les moteurs à piston.

Une autre différence concerne la nature des inclusions liquides. Dans l'approche volumique, puisque les équations de Navier-Stokes sont utilisées pour les deux phases, il est possible de traiter des ligaments ou une colonne de liquide et prendre en compte la physique à l'intérieur de la phase liquide. L'hypothèse de sphéricité n'apparaît que pour la modélisation de la force de traînée ou de l'évaporation. Cette approche

semble donc plus adaptée à la sortie immédiate de l'injecteur dans laquelle l'atomisation primaire est importante.

Dans l'approche mésoscopique, les inclusions sont considérées comme solides, c'est-à-dire comme des points matériels avec une propriété de taille. Conceptuellement, ces deux approches sont donc très différentes même si certains termes semblent comparables.

Dans le travail de cette thèse, l'approche mésoscopique est choisie pour sa capacité à bien différencier les types de mouvement de la phase liquide. Elle possède également des propriétés intéressantes de stabilité par l'ajout d'une 'viscosité' et d'une 'pression' dans la phase liquide. Ces points seront discutés au chapitre 5

## **Deuxième partie**

# **Développements de AVBP pour le calcul de l'injection directe**



---

## Introduction

Le modèle diphasique eulérien a été initialement développé dans AVBP pour des écoulements diphasiques très dilués. Comme nous l'avons vu en introduction, cette hypothèse d'écoulement dilué convient dans le cas d'injection dans des chambres aéronautiques mais dans le cas de sprays de type essence ou Diesel elle n'est plus valable. Le modèle diphasique présenté au chapitre 2 doit donc être adapté aux cas des fractions volumiques élevées et donc prendre en compte les phénomènes physiques qui y sont rattachés.

Cette adaptation de la physique doit aussi être complétée d'une adaptation numérique du code AVBP pour le calcul moteur. Les fortes pressions d'injection rencontrées dans le cas de l'injection Diesel par exemple ainsi que les forts gradients de vitesse ou de fraction volumique dans le spray sont très délicats à gérer numériquement. Une partie du travail de thèse a donc porté sur l'amélioration de la robustesse du code tout en limitant la diffusivité numérique.

L'interaction des gouttes avec les parois dans les moteurs à combustion interne est une problématique importante tant d'un point de vue numérique que physique. Nous discuterons de cette problématique en fin de chapitre.

Enfin, le mouvement de maillage mis en place par [Moureau et al. \(2004\)](#), [Moureau \(2004\)](#) pour la partie monophasique du code AVBP doit être étendu à la partie liquide, et donc aux équations de conservation du liquide.





## Chapitre 4

# Modélisation physique des écoulements diphasiques denses

### 4.1 Classification des régimes diphasiques

Selon Elghobashi (1991, Elghobashi (1994), on peut classer les écoulements diphasiques en différents régimes (Fig. 4.1).

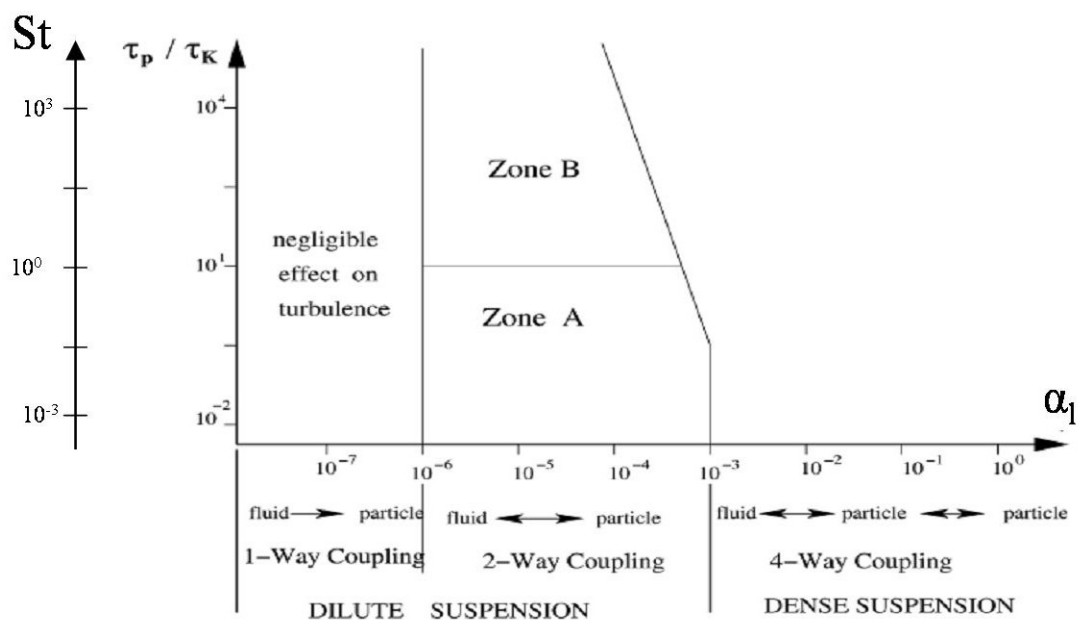


FIG. 4.1 – Classification des régimes d'écoulements diphasiques selon Elghobashi (1994)

Ce classement s'organise en fonction de la fraction volumique de liquide  $\alpha_l$  ainsi que d'un rapport de temps caractéristiques :  $\tau_p$  est le temps caractéristique de Stokes alors que  $\tau_k = \nu/\varepsilon$ , où  $\varepsilon$  est la dissipation

d'énergie cinétique turbulente, est le temps caractéristique relatif à l'échelle de Kolmogorov. Le nombre noté  $S_t$  est le nombre de Stokes défini dans le cas d'un écoulement turbulent par :

$$S_t = \frac{\tau_p}{\tau'} \quad (4.1)$$

où  $\tau'$  est le temps caractéristique des plus grands tourbillons de la phase gazeuse.

D'après ce classement, trois grandes régions peuvent être distinguées. Dans la première région, dite de 'one-way coupling', pour  $\alpha_l < 10^{-6}$ , les particules n'ont aucun effet sur la turbulence du fluide, néanmoins le fluide peut avoir une influence sur la dynamique des particules. Quand la fraction volumique de liquide augmente jusqu'à  $\alpha_l = 10^{-3}$ , les particules peuvent influencer la turbulence du fluide ('two-way coupling'). Elles peuvent soit dissiper l'énergie turbulente si leur Stokes est faible (zone A), soit contribuer à l'augmentation de l'énergie cinétique turbulente si leur Stokes est fort (zone B). Dans la zone A, l'énergie turbulente est dissipée par le travail de la force de traînée qui accélère les particules. Dans la zone B, la forte inertie des particules provoque un détachement tourbillonnaire qui crée ou augmente l'énergie turbulente. Ces mécanismes sont les mécanismes prépondérants pour la modulation de la turbulence gazeuse par des particules solides. Quand la fraction volumique augmente et dépasse  $\alpha_l > 10^{-3}$ , la distance entre les particules diminue si bien que les interactions entre les particules entrent en compte ('four-way coupling'). D'après ce classement, dans le cas des sprays, et étant donné la forte charge de liquide, il semble difficile d'omettre les interactions entre particules. En revanche, l'importance des collisions par rapport au couplage fluide-particules reste à évaluer. Pour des fractions volumiques de liquide de l'ordre de  $\alpha_l > 0.1$ , la turbulence du gaz n'a plus qu'un effet limité sur le mouvement des gouttes.

## 4.2 Importance des collisions

Comme nous l'avons vu, les principales différences entre une zone fortement chargée en gouttelettes et une zone très diluée sont les interactions particules-particules. Pour s'en rendre compte, il est utile de comparer le temps de relaxation  $\tau_p$  avec le temps caractéristique des collisions  $\tau_c$ .

Le temps de relaxation d'une goutte de diamètre  $d$ , de masse volumique  $\rho_l$  évoluant à un Reynolds  $Re$  et subissant un coefficient de traînée  $C_d \approx 24/Re$  s'exprime par :

$$\tau_p = \frac{4d^2\rho_l}{3\mu_g C_d Re_d} \approx \frac{d^2\rho_l}{18\mu_g} \quad (4.2)$$

Le temps caractéristique de collision, qui est le temps qui sépare deux collisions pour une goutte, est exprimé en utilisant la théorie cinétique des gaz (Chapman and Cowling 1970) et en faisant l'analogie entre l'énergie d'agitation moléculaire et la Random Uncorrelated Energy ( $RUE = \delta\theta$ , voir chapitre 2). On obtient :

## 4.2 Importance des collisions

$$\tau_c = \frac{d}{24g_0\alpha_l} \sqrt{\frac{3\pi}{2RUE}} \quad (4.3)$$

dans lequel  $g_0$  est un paramètre que l'on explicitera ultérieurement et que l'on calcule par la formule empirique  $g_0 = (1 - \frac{\alpha_l}{\alpha_m})^{-2.5\alpha_m}$  (Lun and Savage 1986) pour laquelle  $\alpha_m$  est la fraction volumique de liquide maximum et qui correspondant à un entassement maximum. . Par exemple pour des particules sphériques rigides, on a  $\alpha_m \approx 0.64$ .

Le rapport  $\tau_{ratio}$  entre ces deux temps de collision est :

$$\tau_{ratio} = \frac{\tau_c}{\tau_p} \approx \frac{3\mu_g}{4dg_0\rho_l\alpha_l} \sqrt{\frac{3\pi}{2RUE}} \quad (4.4)$$

Pour des gouttes de  $20\mu m$ , de masse volumique  $\rho_l = 800kg.m^{-3}$  dans une chambre de gaz de viscosité dynamique  $\mu_g = 1.5kg.m^{-1}.s^{-1}$  et en prenant  $\alpha_m = 0.7$ , la figure 4.2 montre l'évolution de ce rapport pour différentes valeurs de RUE (en  $m^2.s^{-2}$ ) en fonction de la fraction volumique de liquide  $\alpha_l$ .

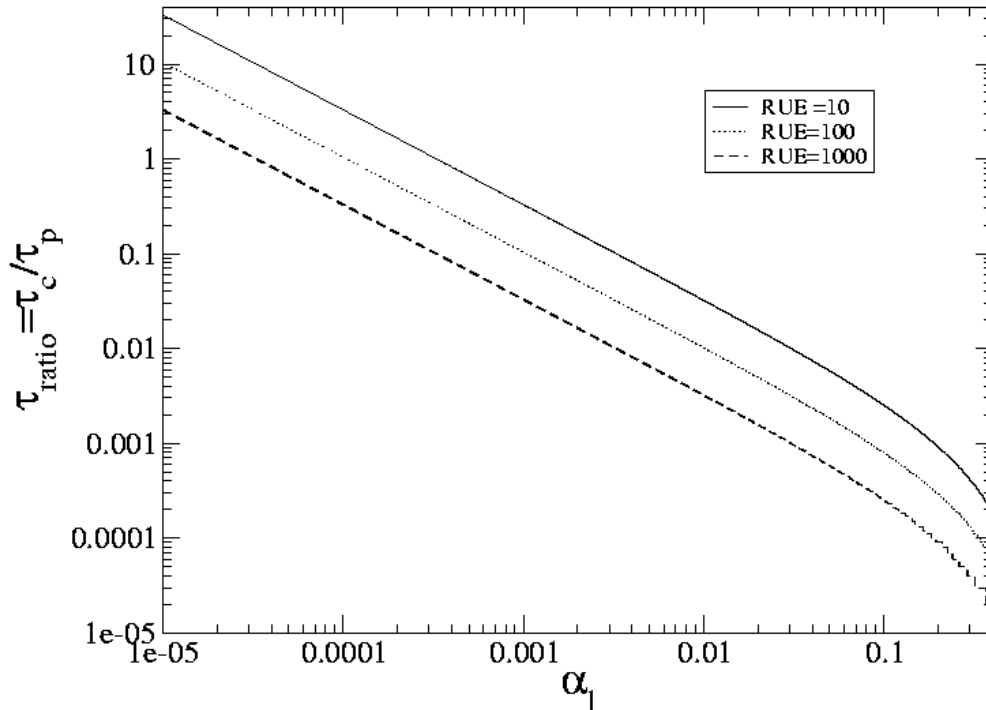


FIG. 4.2 – Rapport des temps caractéristiques de collision et de relaxation

On remarque que quelle que soit la valeur de RUE ( $10m^2.s^{-2}$ ;  $100m^2.s^{-2}$  ou  $1000m^2.s^{-2}$ ), le temps de collision est inférieur au temps de relaxation pour une fraction volumique de liquide de l'ordre de

$10^{-3}$ . Ce qui veut dire que même pour des écoulements qui pourraient être considérés comme 'dilués', les phénomènes de collisions ont un rôle important et ne peuvent pas être négligés. Ils sont d'autant plus importants que la fraction volumique de liquide est élevée et que l'"agitation" (RUE) est élevée. Il est donc nécessaire de prendre en compte les collisions dans le calcul.

### 4.3 Prise en compte des collisions

Les collisions peuvent être prises en compte de différentes manières. La nature même des équations diphasiques bi-fluide obtenues par approche volumique ou par approche statistique ne permet pas d'éviter les zones de fortes concentration de liquide dans lesquelles la fraction volumique de liquide prend des valeurs élevées. Pour éviter ces accumulations, certains auteurs ajoutent un terme, dit de 'pression collisionnelle'  $G(\alpha_g)\partial\alpha_g/\partial x_i$ , dans l'équation de quantité de mouvement du liquide. Ce terme permet de stabiliser numériquement le calcul (Massoudi et al. 1992) et agit très fortement lorsque la fraction volumique de liquide se rapproche d'une valeur limite associée à la fonction  $G(\alpha_g)$ . Différents modèles pour  $G(\alpha_g)$  peuvent être utilisés (Enwald et al. 1996), citons par exemple :  $G(\alpha_g) = \exp(-500(\alpha_g - 0.46))$ . L'inconvénient de ce type de modèle est que le fondement physique reste à déterminer et qu'il n'influe en rien sur le mouvement décorrélé bien que les collisions puissent agir comme terme de production ou de dissipation.

Pour rappel, le principal phénomène physique contribuant à l'évolution du RUM, en écoulement dilué, est la traînée : sans traînée l'énergie décorrélée reste constante. Pour des fractions volumiques supérieures à  $\alpha_l = 10^{-3}$ , le phénomène prépondérant n'est plus la traînée mais les interactions gouttes-gouttes (voir section 4.2) et il faut adapter l'équation de conservation de RUE pour prendre en compte les collisions.

L'idée principale développée ci-dessous est donc de modéliser le taux de variation collisionnel de chaque quantité  $\psi : \mathbb{C}(\psi)$  (cf. Eq. 2.5). Les collisions interviennent dans la modélisation du tenseur de vitesse décorrélée  $\delta\check{R}_{l,ij}$  ainsi qu'au niveau des corrélations triples  $\check{K}_{l,ijk}$  (voir section 2.2). La modélisation de la viscosité  $\widehat{\nu}_{RUV}$  (cf. Eq. 2.51) et du coefficient de diffusion  $\widehat{\kappa}_{RUV}$  (cf. Eq. 2.52) doit donc être adaptée. Pour cela, on utilise la théorie cinétique des gaz denses développée par Jenkins and Richman (1985). L'utilisation de cette théorie a fait l'objet de nombreuses études. On citera notamment les travaux de (Simonin 1991) sur des jets ronds turbulents, de (He and Simonin 1993) pour des écoulements confinés chargés de particules, de Balzer et al. (1996) et Boelle (1997) pour des lits fluidisés et enfin Boelle et al. (1995) pour la validation en écoulement cisailé simple. Une revue complète de la simulation turbulente en lits fluidisés est proposée par Peirano and Leckner (1998). Le modèle de collision présenté ici ainsi que la dérivation des équations et des différents termes collisionnels sont très largement inspirés de cette revue et des travaux de Boelle (1997).

## 4.4 Modélisation des termes collisionnels

En suivant la démarche de [Peirano and Leckner \(1998\)](#) on fait l'analogie entre la température granulaire et l'énergie décorrélée puisque le formalisme est identique.

### 4.4.1 Taux de variation collisionnel

Le taux de variation collisionnel de la quantité  $\psi$  est :

$$\mathbb{C}(\psi) = \int \psi \left( \frac{\partial \check{f}_p}{\partial t} \right)_{coll} dc_p \quad (4.5)$$

[Jenkins and Richman \(1985\)](#) proposent de décomposer ce terme sous la forme :

$$\mathbb{C}(\psi) = \chi(\psi) - \frac{\partial}{\partial x_i} \Theta_i(\psi) - \frac{\partial U_{i,j}}{\partial x_i} \Theta_i \left( \frac{\partial}{\partial \delta u_{p,j}} \psi \right) \quad (4.6)$$

Le calcul de ces termes fait intervenir la fonction de distribution paire  $f^2(x_A, x_B, c_{pA}, c_{pB}, t)$  ainsi que la variation de la quantité  $\psi$  durant la collision. La fonction de distribution paire est définie telle que  $f^2(x_A, x_B, c_{pA}, c_{pB}, t) dx_A dx_B dc_{pA} dc_{pB}$  représente la probabilité de trouver une paire de particules A et B dans un volume  $x_A + dx_A$  et  $x_B + dx_B$  avec des vitesses comprises entre  $c_{pA}$  et  $c_{pA} + dc_{pA}$  et  $c_{pB}$  et  $c_{pB} + dc_{pB}$  respectivement.

Le terme  $\chi(\psi)$  est un terme source, il représente la perte de la quantité  $\psi$  par collision inélastique :

$$\chi(\Psi) = \int_{g,k>0} ((\Psi'_B + \Psi'_A) - (\Psi_B + \Psi_A)) f^2(x_A, x_B, c_A, c_B, t) d_p^2(g.k) dk dc_A dc_B \quad (4.7)$$

où  $g = c_{pA} - c_{pB}$  est la vitesse relative entre les deux particules et  $k$  est le vecteur unité défini par  $dk = x_B - x_A$  avec  $g.k > 0$ . La propriété  $\psi$  d'une particule est notée  $\psi'$  après la collision.

$\Theta_i(\psi)$  est un terme de flux, il représente le transport de  $\psi$  durant les collisions :

$$\Theta_i(\Psi) = \int_{g,k>0} (\Psi'_A - \Psi_A) k_i \left( 1 - \frac{d_p k_j}{2!} \frac{\partial}{\partial x_j} + \dots \right) f^2(x_A, x_B, c_A, c_B, t) d_p^2(g.k) dk dc_A dc_B \quad (4.8)$$

Le dernier terme de l'Eq. (4.6) doit être inclus lorsque  $\psi$  dépend de la fluctuation  $\delta u_{p,j}$ . Ce terme représente une production de  $\psi$  par le gradient de vitesse moyenne.

Pour calculer le terme  $\mathbb{C}(\psi)$ , il faut donc trouver une expression pour  $f^2$  et calculer les termes  $\Delta\psi = (\Psi'_B + \Psi'_A) - (\Psi_B + \Psi_A)$  et  $\Psi'_A - \Psi_A$ .

### 4.4.2 Collisions binaires

On considère une collision binaire inélastique entre deux particules A et B de masse  $m$  et de diamètre  $d_p$ . La modélisation utilisée ne prend pas en compte la coalescence ni la polydispersion. Tous ces différents

phénomènes physiques modifient significativement les bilans de quantité de mouvement et d'énergie pendant les collisions et donc les fermetures des termes collisionnels. Dans le travail proposé ici, on se limite aux effets prépondérants associés aux collisions et on néglige ces phénomènes.

La variation de quantité de mouvement  $J$  des particules  $A$  et  $B$  sont identiques :

$$J = mc'_{pA} - mc_{pA} = mc'_{pB} - mc_{pB} \quad (4.9)$$

De plus :

$$g'.k = -e(g.k) \quad (4.10)$$

où  $g' = c'_{pA} - c'_{pB}$  et  $e$  est le coefficient d'inélasticité ou coefficient de restitution. Ce coefficient, qui représente la perte d'énergie pendant la collision, varie entre 0 et 1, et vaut 1 quand la collision est élastique. A partir des Eq.(4.9) et (4.10), on peut calculer  $J$  :

$$J_i = \frac{1}{2}m(1+e)(g_j k_j)k_i \quad (4.11)$$

A partir des Eqs.(4.9)-(4.11), il est ainsi possible de trouver les variations des moments d'ordre 1, 2 et 3 en vitesse et donc les termes  $\Delta\Psi$  et  $\Psi'_A - \Psi_A$  (Jenkins and Richman 1985).

### 4.4.3 Fonction de distribution paire

La fonction de distribution paire  $f^2$  peut s'exprimer simplement par le produit des deux fonctions de distribution  $f^1$  (Chapman and Cowling 1970) de chaque particule corrigé par le facteur  $g_0 \geq 1$  qui représente la fonction de distribution radiale :

$$f^2(x_A, x_B, c_{pA}, c_{pB}, t) = g_0(x) f^1(x - \frac{1}{2}d_p, c_{pA}, t) f^1(x + \frac{1}{2}d_p, c_{pB}, t) \quad (4.12)$$

$g_0$  prend en compte le fait que les fonctions de distribution des deux particules ne sont pas statistiquement indépendantes. En pratique, elle prend en compte le fait que le nombre de collisions augmente lorsque les particules sont très proches. Lun and Savage (1986) proposent la formule empirique suivante :  $g_0 = (1 - \frac{\alpha_l}{\alpha_m})^{-2.5\alpha_m}$ .

Les deux propriétés importantes de la fonction  $g_0$  sont qu'elle doit tendre vers 1 pour des fractions volumiques faibles et vers l'infini quand la fraction volumique tend vers un compactage maximum ( $\alpha_m$ ). La fonction de Lun and Savage (1986) répond à ces deux propriétés et a montré de bons résultats en écoulements cisailés fortement chargés en petites particules.

### 4.4.4 Développement de Grad

Enfin, pour obtenir l'expression finale des termes collisionnels et la modélisation du tenseur des vitesses décorrélatées, il faut faire une hypothèse sur la forme de la fonction de distribution. Pour cela, Grad (1949)

#### 4.4 Modélisation des termes collisionnels

propose d'écrire la fonction  $f^1$  comme un développement infini de la distribution de Maxwell  $f^0$  à l'aide de polynômes d'Hermite  $H_i^n(c)$  :

$$f^1(x, c_p, t) = f^0(x, c_p, t) \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_i^n(x, t) H_i^n(c_p) \right) \quad (4.13)$$

où les tenseurs  $a_i^n(x, t)$  sont symétriques pour tous leurs indices et  $f^0$  est la fonction de distribution de Maxwell :

$$f^0(x, c_p, t) = \frac{\check{n}_l}{(2/3\pi\delta\check{\theta}_l)^{3/2}} \exp\left(\frac{-3\delta u_{p,i}^2}{4\delta\check{\theta}_l}\right) \quad (4.14)$$

Grad propose de se limiter à une troncature du troisième ordre au lieu d'un développement infini :

$$f^1(x, c_p, t) = \left( H^0 + a_i H_i^1 + \frac{1}{2!} a_{ij} H_{ij}^2 + \frac{1}{3!} a_{ijm} H_{ijm}^3 \right) f^0(x, c_p, t) \quad (4.15)$$

Chaque polynôme d'Hermite est défini en fonction des dérivés de  $f^0$  :

$$f^1(x, c_p, t) = \left( 1 + a_i \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} + \frac{1}{2!} a_{ij} \frac{\partial^2}{\partial c_{p,i} \partial c_{p,j}} + \frac{1}{3!} a_{ijm} \frac{\partial^3}{\partial c_{p,i} \partial c_{p,j} \partial c_{p,m}} \right) f^0(x, c_p, t) \quad (4.16)$$

avec

$$H^0 = 1 \quad (4.17)$$

$$H_i^1 = \frac{1}{f^0} \frac{\partial f^0}{\partial c_{p,i}} = -\frac{3\delta u_{p,i}}{2\delta\check{\theta}_l} \quad (4.18)$$

$$H_{ij}^2 = \frac{1}{f^0} \frac{\partial^2 f^0}{\partial c_{p,i} \partial c_{p,j}} = -\frac{3\delta_{ij}}{2\delta\check{\theta}_l} + \frac{9\delta u_{p,i} \delta u_{p,j}}{4\delta\check{\theta}_l^2} \quad (4.19)$$

$$H_{ijm}^3 = \frac{1}{f^0} \frac{\partial^3 f^0}{\partial c_{p,i} \partial c_{p,j} \partial c_{p,m}} = \frac{9(\delta u_{p,i} \delta_{jm} + \delta u_{p,j} \delta_{im} + \delta u_{p,m} \delta_{ij})}{4\delta\check{\theta}_l^2} - \frac{27\delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \delta u_{p,m}}{8\delta\check{\theta}_l^3} \quad (4.20)$$

L'approximation à l'ordre 3 dans l'Eq. (4.15) n'est valable que dans le cas où l'écoulement ne varie pas trop rapidement. De plus, comme souligné par [Boelle et al. \(1995\)](#) par comparaison avec des simulations numériques lagrangiennes, la fonction de distribution de Grad n'a pas la bonne forme dans le cas d'une forte anisotropie du champ des vitesses décorréliées et est donc limitée aux cas de faibles anisotropies où on préfère la forme proposée par [Richmann \(1989\)](#). Cependant, la distribution de Richmann ne permet pas de dériver les termes collisionnels de manière générale.

A partir des Eq. (2.24) et Eq. (4.16) il est possible d'obtenir des relations entre  $a_i, a_{ij}$  et  $a_{ijm}$  et les moments en vitesse. Appliquée à  $\psi = 1$  on trouve que  $a_i = 0$ . De plus, [Jenkins and Richman \(1985\)](#) montrent que :

$$\delta\check{R}_{l,ij} = \frac{2\delta\check{\theta}_l}{3} \delta_{ij} + a_{ij} \Rightarrow +a_{ii} = 0 \quad (4.21)$$

$$\delta\check{K}_{l,ijm} = a_{ijm} \quad (4.22)$$

$$\delta\check{M}_{l,ijmn} = 4/3(\delta\check{\theta}_l)^2 \delta_{(ij} \delta_{mn)} + 4\delta\check{\theta}_l a_{(ij} \delta_{mn)} \quad (4.23)$$

où  $\delta\check{M}_{p,ijm} = \langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \delta u_{p,m} \delta u_{p,n} \rangle$  est le moment d'ordre 4 en vitesse. D'après Grad, le système de 20 inconnues ( $\check{\alpha}_l, \check{U}_{l,i}, a_{ij}, a_{ijm}$ ) peut être réduit en un système de 13 inconnues en utilisant une contraction du tenseur du troisième ordre :

$$a_{ijm} = \frac{1}{5} (a_{imm} \delta_{jm} + a_{jmm} \delta_{in} + a_{mnn} \delta_{ij}) \quad (4.24)$$

La distribution  $f^1$  peut donc être réécrite :

$$f^1(x, c_p, t) = \left( 1 + \frac{9a_{ij}}{8(\delta\check{\theta}_l)^2} \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} + \frac{9a_{imm}}{40(\delta\check{\theta}_l)^2} \left( \frac{3\delta u_{p,i}^2}{2\delta\check{\theta}_l} - 5 \right) \delta u_{p,i} \right) f^0(x, c_p, t) \quad (4.25)$$

Le système de 13 inconnues peut être résolu avec l'équation de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de RUE et des équations de transport des  $a_{ij} = \delta\check{K}_{l,ij}^*$  et  $a_{imm} = \delta\check{K}_{l,imm}$ . L'équations de transport des  $a_{ij}$  est obtenue à partir des Eq. (2.20) avec  $\psi = \delta u_{p,i} u_{p,j}$ ,  $\psi = \delta u_{p,i} u_{p,i}$  et des Eq. (4.21), (4.22) et (4.24). L'équation de transport des  $a_{imm}$  est obtenue à partir des Eq. (2.20) avec  $\psi = \delta u_{p,i} \delta u_{p,m} \delta u_{p,m}$  et des Eq. (4.21) à (4.24). Ces équations de transport ne sont pas réécrites dans ce manuscrit mais le lecteur intéressé pourra lire, par exemple, la revue de Peirano and Leckner (1998).

#### 4.4.5 Théorie linéaire

Il est maintenant nécessaire d'explicitier les termes de collisions en utilisant la fonction de distribution calculée précédemment à l'Eq. (4.25). Pour cela, Jenkins and Richman (1985) considèrent des faibles perturbations (domaine linéaire) autour de l'état de Maxwell. Ils arrivent ainsi à exprimer les termes de collision  $\chi(\psi)$  de l'Eq. (4.7) et  $\Theta_i(\psi)$  de l'Eq. (4.8) en fonction, notamment, des coefficients  $a_{ij}$  et  $a_{ijj}$  :

$$\chi(m_p u_{p,i}) = 0 \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \Theta_j(m_p u_{p,i}) &= 2\alpha_l^2 \rho_l g_0 (1+e) \frac{2\delta\check{\theta}_l}{3} \delta_{ij} \\ &\quad - \frac{4}{5} \alpha_l^2 \rho_l d g_0 (1+e) \sqrt{\frac{2\delta\check{\theta}_l}{3\pi}} (2S_{l,ij} + S_{l,mm} \delta_{ij}) \\ &\quad + \frac{4}{5} \alpha_l^2 \rho_l g_0 (1+e) a_{ij} \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \chi\left(\frac{1}{2} m_p \delta u_{p,j} \delta u_{p,j}\right) &= \frac{12}{d^2} \alpha_l^2 \rho_l g_0 (e^2 - 1) \sqrt{\frac{2\delta\check{\theta}_l}{3\pi}} \frac{2\delta\check{\theta}_l}{3} \\ &\quad + 3\alpha_l^2 \rho_l g_0 (1 - e^2) \frac{2\delta\check{\theta}_l}{3} S_{l,mm} \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\Theta_i\left(\frac{1}{2} m_p \delta u_{p,j} \delta u_{p,j}\right) = -\frac{6}{5} \alpha_l^2 \rho_l g_0 (1+e) a_{ijj} - 4\alpha_l^2 d \rho_l g_0 (1+e) \sqrt{\frac{2\delta\check{\theta}_l}{3\pi}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{2\delta\check{\theta}_l}{3} \right) \quad (4.29)$$

Il reste maintenant à explicitier et faire des hypothèses sur les termes  $a_{ij}$  et  $a_{ijj}$  qui sont les tenseurs  $\delta\check{K}_{l,ij}^*$  et  $\delta\check{K}_{l,imm}$  respectivement. Ces hypothèses ainsi que la modélisation finale retenue sont détaillés dans la section suivante.



## 4.5 Nouvelles équations bi-fluide pour les écoulements chargés

La prise en compte des collisions a deux modifications essentielles sur les équations du modèle bi-fluide. Premièrement, la contribution cinétique du tenseur de corrélation des vitesses résiduelles est modifiée par la prise en compte de l'effet des collisions sur le libre parcours moyen des particules. De plus, une contribution collisionnelle est rajoutée par les termes de type  $\mathbb{C}(\psi)$ . Ici, et afin de respecter le formalisme mésoscopique, les corrélations en vitesse fluide-particule de type  $\langle u'_{g,i} \delta u_{p,i} \rangle_l$  ne sont pas prises en compte. En effet,  $u'_{g,i}$ , étant la fluctuation de vitesse de la phase gazeuse vue par la particule, on a  $u'_{g,i} = 0$  puisque la moyenne d'ensemble sur les réalisations de la phase liquide se fait pour une seule réalisation de la phase gazeuse.

Les seules équations présentant des modifications sont les équations de conservation de quantité de mouvement et d'énergie décorrélée. Elles sont rappelées ci-dessous, avec en gras les termes ajoutés par rapport aux équations sans collision :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} \widehat{U}_{l,j} &= \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\widehat{U}_{g,i} - \widehat{U}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{\delta R}_{l,ij} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} P_{SGS} - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{l,ij}^* + \mathbf{C}(\mathbf{m}_p \mathbf{u}_{p,i}) \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta \theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta \theta}_l \widehat{U}_{l,i} &= -2 \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} \widehat{\delta \theta}_l - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta K}_{l,ij} \\ &\quad - \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} + (-P_{SGS} - T_{l,ij}^*) \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} \\ &\quad + \mathbf{C}\left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_p \delta \mathbf{u}_{p,j} \delta \mathbf{u}_{p,j}\right) \end{aligned} \quad (4.31)$$

En remplaçant les termes collisionnels par leur expression simplifiée (Eq. 4.6) et le terme  $\chi(m_p \delta u_{p,i})$  étant nul, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} \widehat{U}_{l,j} &= \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\widehat{U}_{g,i} - \widehat{U}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\widehat{\delta R}_{l,ij} + \Theta_j(\mathbf{m}_p \delta \mathbf{u}_{p,i})) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} P_{SGS} - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{l,ij}^* \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta \theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta \theta}_l \widehat{U}_{l,i} &= -2 \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} \widehat{\delta \theta}_l - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta K}_{l,ij} \\ &\quad - \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} + (-P_{SGS} - T_{l,ij}^*) \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} \\ &\quad + \chi\left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_p \delta \mathbf{u}_{p,j} \delta \mathbf{u}_{p,j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \Theta_i\left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_p \delta \mathbf{u}_{p,j} \delta \mathbf{u}_{p,j}\right) \\ &\quad - \frac{\partial U_{l,i}}{\partial x_j} \Theta_j(\mathbf{m}_p \delta \mathbf{u}_{p,i}) \end{aligned} \quad (4.33)$$

Le tenseur  $\widehat{\delta R}_{l,ij}$  représente une contribution cinétique alors que les termes  $\chi$  et  $\Theta$  sont des contributions collisionnelles. On présente dans les sections suivantes la modélisation finale de ces deux contributions.

#### 4.5.1 Modélisation de la contribution cinétique

Le tenseur de corrélation des vitesses résiduelles  $RUV$  est modélisé par une hypothèse de Boussinesq prenant en compte non seulement les effets de traînée comme dans les travaux de [Kaufmann \(2004\)](#) mais aussi les collisions :

$$\widehat{\delta R}_{l,ij} = \frac{2}{3} \widehat{\delta \theta}_l \delta_{ij} - 2 \widehat{v}_{RUVc} \left( \widehat{S}_{l,ij} - \frac{\widehat{S}_{l,mm} \delta_{ij}}{3} \right) = \widehat{P}_{RUV} \delta_{ij} - 2 \widehat{v}_{RUVc} \widehat{S}_{l,ij}^* \quad (4.34)$$

La viscosité  $\widehat{v}_{RUVc}$  s'écrit dorénavant ([Boelle et al. 1995](#)) :

$$\widehat{v}_{RUVc} = \frac{\tau_p \widehat{\delta \theta}_l}{3} \left( 1 + \bar{\alpha}_l g_0 \frac{2}{5} (1+e)(3e-1) \right) \frac{1}{\left( 1 + \frac{\tau_p (1+e)(3-e)}{\tau_c} \right)} \quad (4.35)$$

L'indice  $c$  signifie que le terme a été modifié pour prendre en compte le temps collisionnel. Dans le cas des écoulements très dilués ( $\alpha_l \rightarrow 0$  et  $\tau_c \rightarrow \infty$ ) on retrouve  $\widehat{v}_{RUVc} = v_{RUV}$ . Cette viscosité 'collisionnelle' apparaît donc comme une extension du coefficient "classique" de [Kaufmann \(2004\)](#) aux cas fortement chargés, par diminution du libre parcours moyen. Fondamentalement, même dans le cas collisionnel, l'hypothèse de Boussinesq est toujours utilisée mais on pourrait aussi utiliser une équation de transport pour le tenseur  $\widehat{\delta R}_{l,ij}$ .

Le coefficient de diffusion  $\widehat{\kappa}_{RUVc}$  évolue également. Il est tel que :

$$\widehat{\delta K}_{l,ij} = -\widehat{\kappa}_{RUVc} \frac{\partial \widehat{\delta \theta}_l}{\partial x_j} \quad (4.36)$$

avec ([Boelle et al. 1995](#)) :

$$\widehat{\kappa}_{RUVc} = \frac{2}{3} \widehat{\delta \theta}_l \frac{\left( 1 + \bar{\alpha}_l g_0 \frac{3}{5} (1+e)^2 (2e-1) \right)}{\left( \frac{9}{5\tau_p} + \frac{(19-33e)(1+e)}{100\tau_c} \right)} \quad (4.37)$$

De même que pour la viscosité, le coefficient de diffusion présente un bon comportement dans les zones diluées ( $\alpha_l \rightarrow 0$ ) où il tend vers la valeur "classique"  $\kappa_{RUV} = \frac{10}{27} \tau_p \delta \theta_p$  ([Kaufmann 2004](#)).

#### 4.5.2 Modélisation de la contribution collisionnelle

Pour l'équation de quantité de mouvement, un nouveau tenseur  $\bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta R}_{p,ij}^c = \Theta_j (m_p \delta u_{p,i})$  apparaît dans l'équation de quantité de mouvement. Une hypothèse de Boussinesq est aussi appliquée sur ce tenseur. Pour cela, la viscosité collisionnelle  $\widehat{v}_{coll}$  ainsi qu'une pression collisionnelle  $\widehat{P}_{coll}$  et un terme de type 'bulk viscosity'  $\widehat{\xi}_c$  sont introduits.

Le terme collisionnel dans l'équation de quantité de mouvement s'écrit :

$$\mathbb{C}(\widehat{m_p u_{p,i}}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \Theta_j(m_p \delta u_{p,i}) \quad (4.38)$$

avec :

$$\Theta_j(m_p \delta u_{p,i}) = \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta R}_{l,ij}^c = \left( \widehat{P}_{coll} - \widehat{\xi}_c \frac{\partial \widehat{U}_{l,k}}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} - 2 \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{v}_{RUV_{coll}} \widehat{S}_{l,ij}^* \quad (4.39)$$

La partie sphérique du tenseur fait apparaître un terme de pression dite 'pression collisionnelle'  $\widehat{P}_{coll} = \frac{4}{3} \bar{\alpha}_l^2 \rho_l g_0 (1+e) \widehat{\delta \theta}_l$  ainsi qu'un terme du type 'bulk viscosity'  $\widehat{\xi}_c = \frac{4}{3} \bar{\alpha}_l^2 \rho_l g_0 (1+e) d \sqrt{\frac{2 \widehat{\delta \theta}_p}{3\pi}}$ . Pour la partie non-sphérique du tenseur, on peut définir une viscosité collisionnelle  $\widehat{v}_{coll}$  définie par (Boelle et al. 1995) :

$$\widehat{v}_{coll} = \left( \frac{4}{5} \bar{\alpha}_l g_0 (1+e) \left( \widehat{v}_{RUV_c} + d \sqrt{\frac{2 \widehat{\delta \theta}_p}{3\pi}} \right) \right) \quad (4.40)$$

Pour l'équation d'énergie décorrélée, le terme collisionnel est modélisé par :

$$\mathbb{C}\left(\frac{1}{2} \widehat{m_p \delta u_{p,j} \delta u_{p,j}}\right) = \chi \left( \frac{1}{2} m_p \delta u_{p,j} \delta u_{p,j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \Theta_i \left( \frac{1}{2} m_p \delta u_{p,j} \delta u_{p,j} \right) - \frac{\partial U_{l,i}}{\partial x_j} \Theta_j(m_p \delta u_{p,i}) \quad (4.41)$$

$$\approx \underbrace{-\bar{\alpha}_l \rho_l \frac{1-e^2}{3\tau_c} \widehat{\delta \theta}_l}_{\text{I}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\kappa}_{coll} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{\delta \theta}_l \right)}_{\text{II}} - \underbrace{\frac{\partial U_{l,i}}{\partial x_j} \left( \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta R}_{l,ij}^c \right)}_{\text{III}} \quad (4.42)$$

où  $\widehat{\kappa}_{coll}$  est le coefficient de diffusion par collision :

$$\widehat{\kappa}_{coll} = \bar{\alpha}_l g_0 (1+e) \left( \frac{6}{5} \widehat{\kappa}_{RUV_c} + \frac{4}{3} d \sqrt{\frac{2 \widehat{\delta \theta}_l}{3\pi}} \right) \quad (4.43)$$

Le terme (I) représente la dissipation d'énergie décorrélée par l'inélasticité des collisions. Pour ce terme, on se contente de l'approximation proposée par Peirano and Leckner (1998). L'hypothèse est que les termes de type  $d_p U / (L \sqrt{\widehat{\delta \theta}})$ , dans lequel U est une vitesse caractéristique et L une longueur caractéristique sont petits.

Le terme (II) représente la diffusion d'énergie décorrélée par collision. Enfin, le terme (III) représente la production de RUE par cisaillement et compression à travers les collisions. Les nouvelles équations de quantité de mouvement et d'énergie décorrélée obtenues sont présentées dans les sections suivantes.

### 4.5.3 Équation de quantité de mouvement

Le tenseur de contrainte total prenant en compte les contributions cinétique et collisionnelle est :

$$\widehat{\delta\Sigma_{p,ij}^{tot}} = \left( \widehat{P_{RUV}} + \widehat{P_{coll}} - \widehat{\xi}_c \frac{\partial \widehat{U}_{l,k}}{\partial x_k} \right) \delta_{i,j} - 2\widehat{\alpha}_l \rho_l (\widehat{\mathbf{v}_{RUVc}} + \widehat{\mathbf{v}_{coll}}) \widehat{S}_{l,ij}^* \quad (4.44)$$

que l'on peut réécrire  $\widehat{\delta\Sigma_{p,ij}^{tot}} = \widehat{P_{tot}} - 2\widehat{\alpha}_l \rho_l \widehat{\mathbf{v}_{tot}} \widehat{S}_{l,ij}^*$ . L'équation de quantité de mouvement filtrée devient donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \widehat{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} \widehat{U}_{l,j} &= \frac{\widehat{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\widehat{U}_{g,i} - \widehat{U}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \widehat{P_{tot}} + \frac{\partial}{\partial x_j} 2\widehat{\alpha}_l \rho_l \widehat{\mathbf{v}_{tot}} \widehat{S}_{l,ij}^* \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} P_{SGS} - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{l,ij}^* \end{aligned} \quad (4.45)$$

### 4.5.4 Équation de conservation de RUE

L'équation de conservation de l'énergie décorrélée s'écrit dorénavant :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \widehat{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \widehat{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta\theta}_l \widehat{U}_{l,i} &= -2 \frac{\widehat{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} \widehat{\delta\theta}_l - \widehat{\alpha}_l \rho_l \frac{1-e^2}{3\tau_c} \widehat{\delta\theta}_l \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta K_{l,ij}^{tot}} - \widehat{\delta\Sigma_{l,ij}^{tot}} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} + (-P_{SGS} - T_{l,ij}^*) \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} \end{aligned} \quad (4.46)$$

Les deux premiers termes du membre de droite représentent la dissipation d'énergie décorrélée par, respectivement, recorrélation par la traînée et inélasticité des collisions. Le troisième terme est un terme de diffusion. Le quatrième terme est le terme de production d'énergie décorrélée par les effets indirects de la phase porteuse et par les collisions. Il provient du terme diffusif du tenseur RUV dans l'équation de quantité de mouvement. L'énergie prélevée dans le mouvement corrélé par diffusion est transférée en énergie décorrélée par ce terme. Cette énergie décorrélée est produite par compression et cisaillement à travers la corrélation avec la phase porteuse mais aussi par compression et cisaillement par choc entre les particules. Les échanges d'énergie entre le mouvement corrélé, le mouvement décorrélé et le mouvement de sous-maille sont résumés sur la figure (4.3)

Comme nous l'avons vu en §2.4.2, l'énergie transférée du mouvement corrélé résolu au mouvement de sous-maille est intégralement transférée en énergie décorrélée résolue.

Sans les termes de sous-maille, on ne peut produire d'énergie décorrélée puisque tous les termes de production sont proportionnels à l'énergie décorrélée. Le terme de sous-maille, sous l'influence d'un gradient de vitesse du champ corrélé contribue donc à la production de RUE dans un champ initialement totalement corrélé. On comprend alors l'utilité des termes de sous-maille notamment dans le cas où un

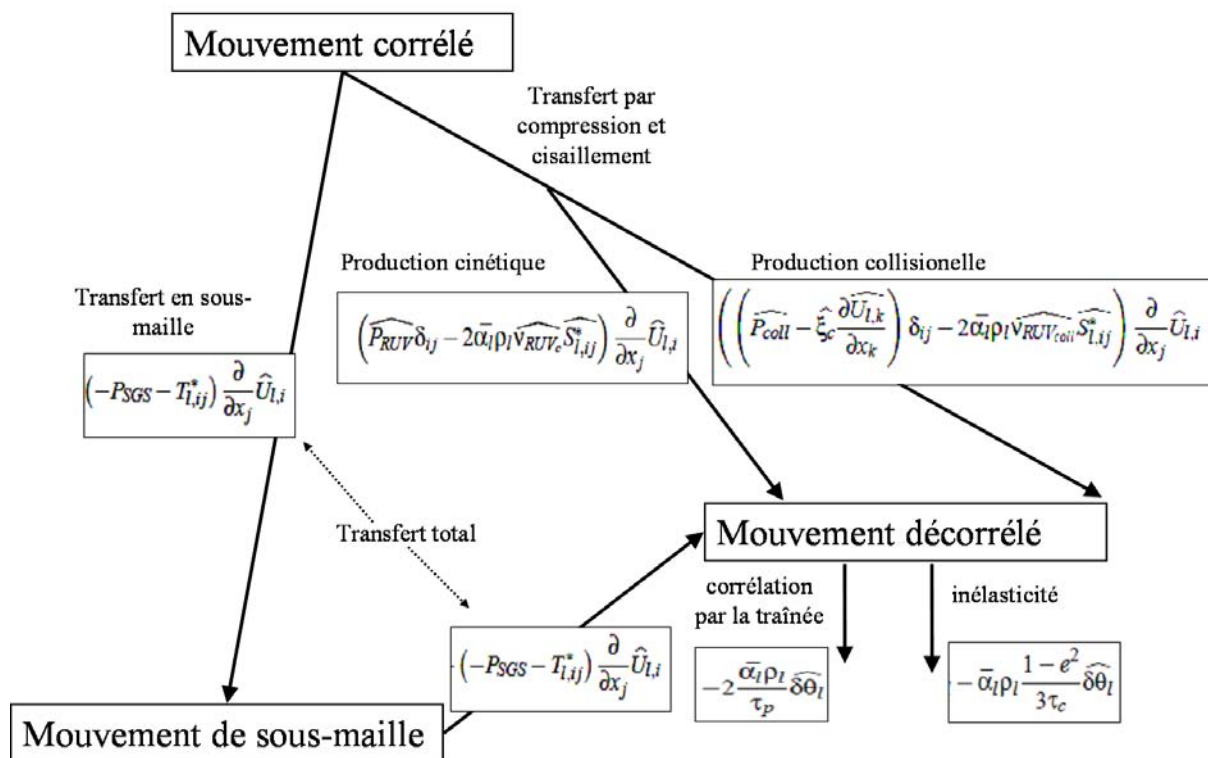


FIG. 4.3 – Principe du transfert d'énergie pour la phase liquide

paquet de gouttes totalement corrélées, ayant une vitesse de déplacement non nulle, rencontre un paquet de gouttes aux repos (figure 4.4). Chaque paquet de gouttes n'ayant pas d'énergie décorrélée, l'apparition d'une énergie décorrélée ne se fera que quand les deux paquets seront dans la même maille. Le terme de production de sous-maille crée alors de la RUE .

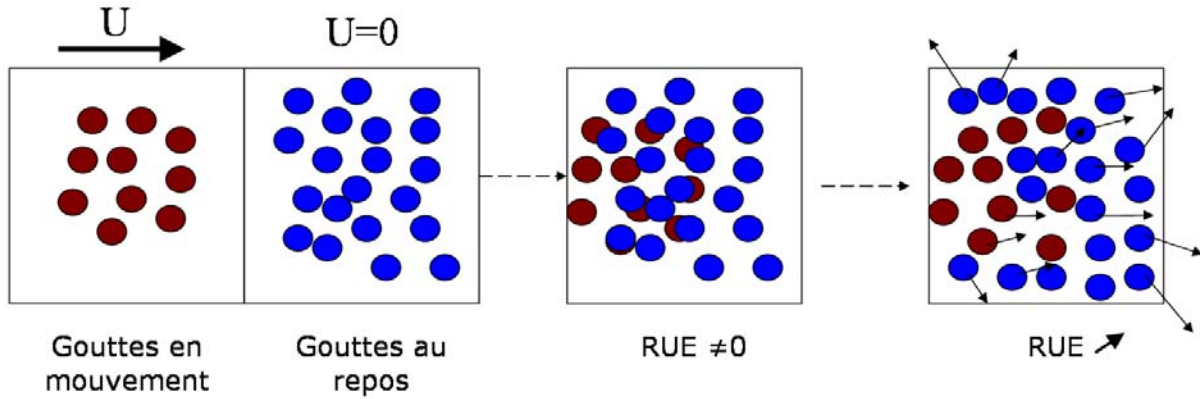


FIG. 4.4 – Cas de production d'énergie décorrélée par compression

## 4.6 Influence des termes collisionnels

Suite à la prise en compte des phénomènes de collisions, de nouvelles fermetures sont apparues dans les équations de QDM et de conservation de RUE. L'analyse suivante consiste à déterminer comment évoluent ces grandeurs par rapport au modèle original d'AVBP qui ne prend pas en compte les collisions.

Pour cela, on redéfinit les termes suivants :

$$\kappa_{tot} = \kappa_{RUV_c} + \kappa_{coll} \quad (4.47)$$

$$\nu_{tot} = \nu_{RUV_c} + \nu_{coll} \quad (4.48)$$

$P_{RUV}$ ,  $\nu_{RUV}$  et  $\kappa_{RUV}$  sont issus de la modélisation de Kaufmann (2004) dans le cas très dilué. Afin de quantifier l'influence des termes de collisions, on trace l'évolution, en fonction de la fraction volumique de liquide, des rapports  $P_{ratio}$ ,  $\nu_{ratio}$  et  $\kappa_{ratio}$  définis par :

$$P_{ratio} = \frac{P_{coll}}{P_{RUV}} ; \nu_{ratio} = \frac{\nu_{tot}}{\nu_{RUV}} \text{ et } \kappa_{ratio} = \frac{\kappa_{tot}}{\kappa_{RUV}}$$

On se place dans le cas (cf. §4.2) pour lequel on a calculé précédemment  $\tau_{ratio}$  c'est-à-dire pour des gouttes de  $20\mu m$  de masse volumique  $\rho_l = 800 kg.m^{-3}$  avec un gaz environnant de viscosité cinématique  $\mu_g = 1.5 Pa.s$ , et un coefficient de restitution de 0.8 .

Les figures 4.5 et 4.6 présentent l'évolution de  $P_{ratio}$  pour différentes valeurs de la fraction volumique maximum  $\alpha_m$  (voir l'expression de  $g_0$  page 63).

## 4.6 Influence des termes collisionnels

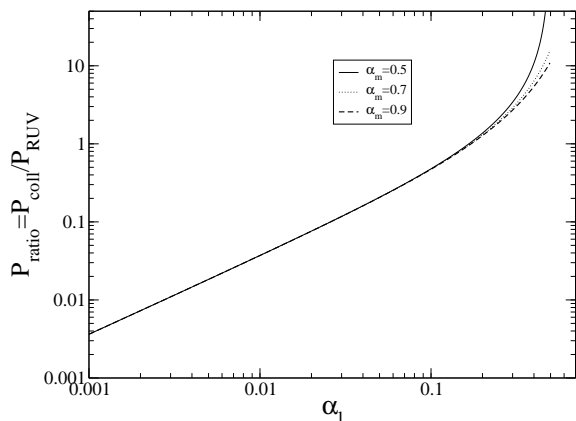


FIG. 4.5 – Evolution de  $P_{ratio}$  en fonction de la fraction volumique de liquide pour différentes valeurs du paramètre  $\alpha_m$ .

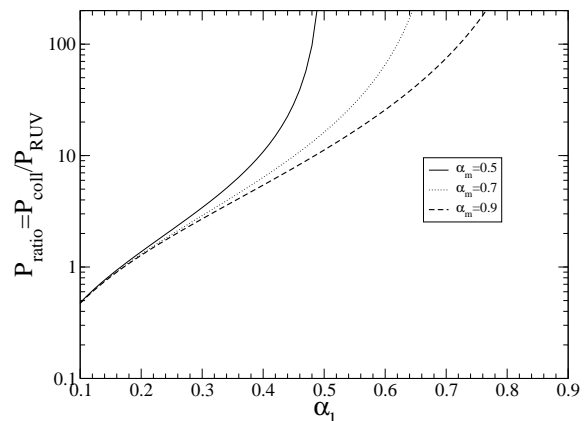


FIG. 4.6 – Evolution de  $P_{ratio}$  en fonction de la fraction volumique de liquide pour différentes valeurs du paramètre  $\alpha_m$ . Zone dense

On remarque que, d'après la Fig. 4.5,  $P_{coll}$  est toujours inférieure à  $P_{RUV}$  pour des fractions volumiques inférieures à  $10^{-1}$  et ce quelle que soit la valeur du paramètre  $\alpha_m$ . La pression de collision devient même prédominante dans les zones très chargées (Fig. 4.6) avec une croissance exponentielle quand  $\alpha_l$  se rapproche de  $\alpha_m$ . A noter que  $P_{ratio}$  est une quantité indépendante de  $RUE$ .

Les figures 4.7 et 4.8 montrent l'évolution des rapports  $\nu_{ratio}$  et  $\kappa_{ratio}$  pour différentes valeurs de  $\delta\theta = RUE$  (en  $m.s^{-1}$ ) en fonction de la fraction volumique de liquide  $\alpha_l$ . Ces résultats confirment le bon comportement dans les zones diluées puisque  $\lim_{\alpha_l \rightarrow 0} \nu_{ratio} = 1$  et  $\lim_{\alpha_l \rightarrow 0} \kappa_{ratio} = 1$ . La deuxième remarque est que, excepté dans les zones très diluées ou très denses ( $\alpha_l \approx \alpha_m$ ), la viscosité et la diffusivité, dans le cas collisionnel, diminuent fortement, quand la fraction volumique de liquide augmente, par rapport au cas sans collisions et ce d'autant plus que  $RUE$  est élevée.

Cette diminution de viscosité (et de diffusivité), par rapport au cas sans collision, s'explique par une diminution de la contribution cinétique inhibée par les effets collisionnels et notamment par une diminution du libre parcours moyen. Les mécanismes visqueux de la théorie cinétique des gaz ont donc leur pendant pour la phase dispersée liquide, la seule différence étant les échelles de longueurs qui ne sont pas comparables.

La figure 4.9 présente le mécanisme de viscosité par contribution cinétique telle qu'expliquée par Grad (1949) et par Panton (1984). De chaque côté d'un plan  $A$ , deux couches ou ensembles de particules évoluent à des vitesses moyennes différentes. Par mouvement aléatoire particulière (mouvement d'agitation), des particules passent d'un côté du plan à un autre contribuant à un échange de quantité de mouvement à travers le plan  $A$ . Cet échange permet d'obtenir un profil de vitesse moyenne et correspond à un effet de viscosité entre deux couches fluides évoluant à des vitesses différentes. Cette viscosité

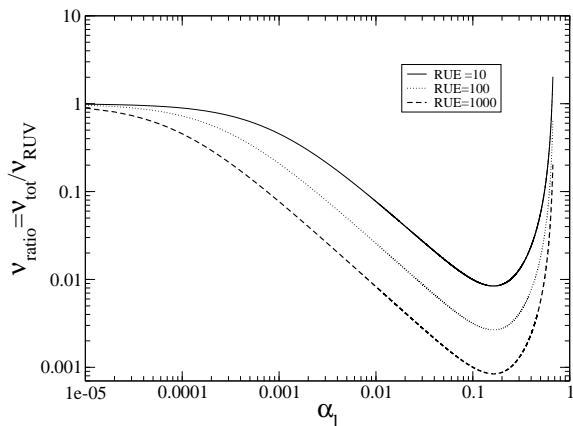


FIG. 4.7 – Évolution de  $v_{ratio}$  en fonction de la fraction volumique de liquide pour différentes valeurs d'énergie RUE.

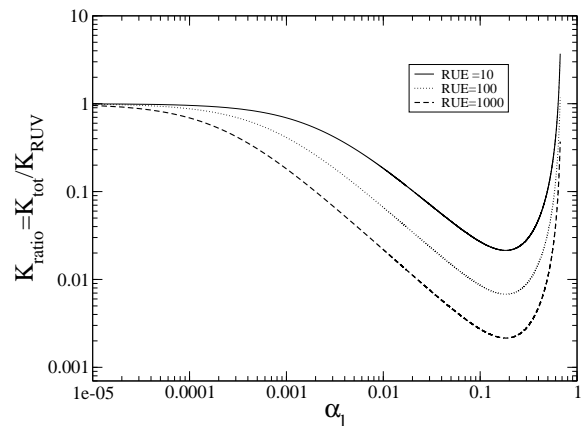


FIG. 4.8 – Évolution de  $\kappa_{ratio}$  en fonction de la fraction volumique de liquide pour différentes valeurs d'énergie RUE.

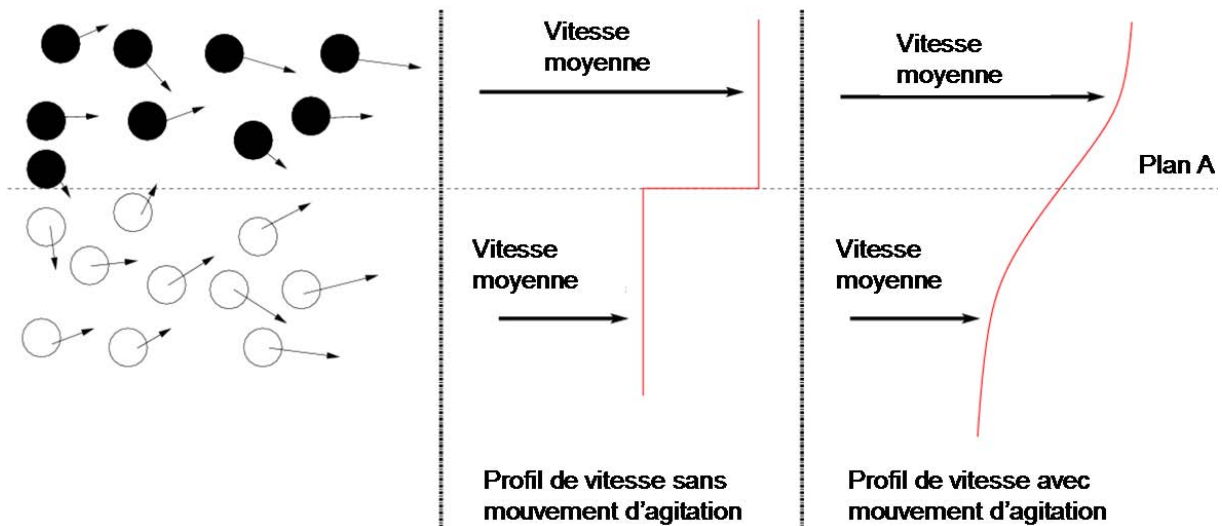


FIG. 4.9 – Mécanismes visqueux par contribution cinétique dans la théorie cinétique des gaz.

$v$  peut s'exprimer comme le produit d'une échelle de longueur caractéristique  $l$  égale au libre parcours moyen transversal et d'une vitesse caractéristique  $\delta u$  :

$$v \propto l \delta u$$

Dans le cas où toutes les particules ont des vitesses corrélées, la vitesse moyenne correspond à la vitesse de chaque particule et le profil de vitesse moyen obtenu est constitué d'un front au niveau du plan de séparation entre les couches (Fig. 4.9). Ce cas correspond alors à une viscosité très faible. Lorsque le nombre de gouttes par volume devient important, l'interpénétration des particules à travers le plan est freinée par les collisions. Ainsi le profil moyen présente un gradient plus important entre les deux



couches, preuve d'une viscosité plus faible par diminution de la longueur caractéristique. La viscosité est donc diminuée dans le cas collisionnel, ce qui explique les résultats des figures 4.7 et 4.8

## 4.7 Quelques réflexions sur le modèle de collisions

Le modèle de collision présenté est développé par analogie avec la théorie cinétique des gaz et adapté aux écoulements diphasiques. Ce modèle présente néanmoins deux défauts de réalisme :

- Ce modèle est limité aux écoulements monodisperses ce qui présente dans le cas de spray moteurs un gros inconvénient. Adapter le modèle au cas des écoulements polydisperses nécessite de prendre en compte des collisions binaires entre des gouttes de rayon et donc de masses différentes.
- Toutes les collisions dans un spray ne conduisent pas à un rebond. Jiang et al. (1992) ainsi que Qian and Law (1997) discernent différents régimes de collision pour des gouttes d'hydrocarbures (Fig. 4.10). Suivant le nombre de Weber ainsi que le critère d'impact  $B$ , cinq régimes apparaissent. Le critère d'impact dénote l'aspect rasant ( $B=1$ ) ou frontal ( $B=0$ ) de la collision. Il faut donc adapter le modèle aux différents régimes de collision ainsi que conditionner la probabilité de collisions rebondissantes suivant les régimes.

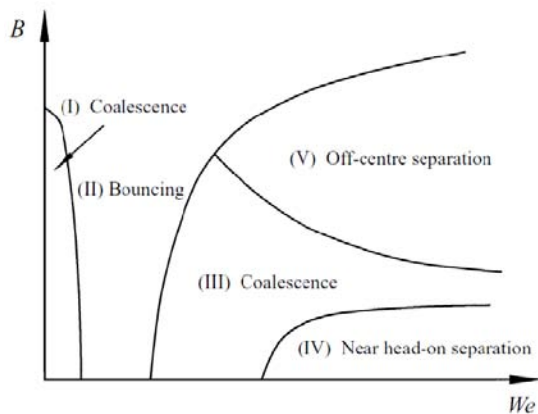


FIG. 4.10 – Régime de collision en fonction du facteur d'impact  $B$  et du nombre de Weber  $We$  d'après Qian and Law (1997).

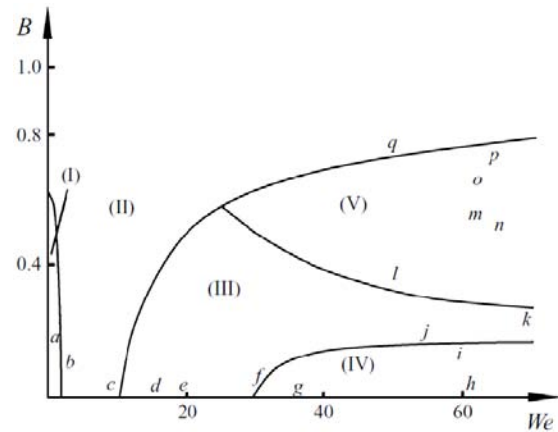


FIG. 4.11 – Régime de collision en fonction du facteur d'impact  $B$  et du nombre de Weber  $We$  d'après Qian and Law (1997). Données numériques.

A partir de ces cinq régimes, il est intéressant de regrouper trois tendances distinctes :

- les régimes conduisant à une goutte plus grosse, c'est le régime de coalescence ( $I$ , et  $III$ ) ;
- les régimes recréant des gouttes de taille identique à l'origine ( $II$ ) ;
- les régimes conduisant à l'apparition de gouttes satellites ( $IV$ , et  $V$ ).

C'est dans l'optique de ces 3 tendances qu'il faut modifier le modèle de collisions. Les travaux de **Qian and Law (1997)** ont montré que le rebond apparaissait quand le film gazeux entre les gouttes qui se rapprochent ne parvient pas à être expulsé. **Pan and Suga (2005)** ont retrouvé ce résultat par la simulation et ont montré que la pression du gaz jouait un rôle majeur. Ainsi dans le cas de l'injection dans les moteurs à piston, la pression dans la chambre de combustion pouvant être très élevée, on peut s'attendre, *a priori*, à une augmentation des phénomènes de rebond.

## 4.8 Quelques réflexions sur les équations du gaz

### 4.8.1 Différence entre écoulement 'dilué' et 'dense'

On s'intéresse ici essentiellement aux équations du gaz dans le cas dilué et dans le cas dense.

Pour passer des équations du gaz monophasique aux équations du gaz dans la version 'écoulement dilué', on rajoute aux équations du gaz monophasique un terme dû à la force de traînée ainsi qu'un terme d'évaporation. Le gaz ne subit l'influence du liquide que par ces deux termes. Il n'y a, par exemple, pas d'effet de compression dû à la présence du liquide. En effet, la fraction volumique de gaz n'est pas présente dans les équations de conservation et on considère implicitement que le gaz occupe tout le volume de contrôle, ce qui pose un problème de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie du gaz. Dans les zones denses, ces trois quantités sont surestimées.

On récapitule ci-dessous les équations en écoulement dilué et en écoulement dense, dans le cas sans force de traînée, évaporation ni filtrage.

### Équations en écoulement dilué

Les équations du gaz pour des écoulements diphasiques dilués sans terme d'échange sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_g U_{g,j} = 0 \quad (4.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} U_{g,i} \rho_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_g U_{g,i} U_{g,j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{P}_g + \frac{\partial}{\partial x_j} T_{g,ij} \quad (4.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g E_{t_g} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_g U_{g,j} E_{t_g} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{P}_g U_{g,j} + \frac{\partial}{\partial x_j} T_{g,ij} U_{g,i} \quad (4.51)$$

### Équations en écoulement dense

Les équations du gaz pour des écoulements diphasiques denses sans terme d'échange entre les phases sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g U_{g,j} = 0 \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g U_{g,i} \rho_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g U_{g,i} U_{g,j} = -\alpha_g \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{P}_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g T_{g,ij} \quad (4.53)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g E_{t_g} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \rho_g U_{g,j} E_{t_g} = -P_g \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g - \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \bar{P}_g U_{g,j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g T_{g,ij} U_{g,i} \quad (4.54)$$

Pour évaluer les différences entre les équations 'denses' et 'diluées', on écrit les équations denses sous la forme d'équations 'diluées' plus un terme additionnel correctif  $C_{orr}$ .

On obtient les équation 'denses' sous une forme faisant apparaître les équations 'diluées' par la formule généralisée ( $k = 1, \dots, 3$ ) :

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \rho_g \Psi_k + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_g \Psi_k U_{g,j})}_{\text{Équations en 'dilué'}} = \rho_g \Psi_k \underbrace{\left( -\frac{\alpha_l}{\alpha_g} \frac{\partial U_{l,j}}{\partial x_j} + \frac{U_{g,j} - U_{l,j}}{\alpha_g} \frac{\partial \alpha_l}{\partial x_j} \right)}_{C_{orr}} + \Sigma_k / \alpha_g \quad (4.55)$$

avec :

$$\Psi_1 = 1 \quad ; \quad \Sigma_{1,i,j} = 0 \quad (4.56)$$

$$\Psi_2 = U_{g,i} \quad ; \quad \Sigma_{2,i,j} = -\alpha_g \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{P}_g + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g T_{g,ij} \quad (4.57)$$

$$\Psi_3 = E_{t_g} \quad ; \quad \Sigma_{3,i,j} = -P_g \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g - \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g \bar{P}_g U_{g,j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_g T_{g,ij} U_{g,i} \quad (4.58)$$

L'évaluation de l'impact de la prise en compte de la fraction volumique du gaz  $\alpha_g$  dans les équations de conservation implique l'analyse du terme additionnel correctif  $C_{orr}$ .

#### 4.8.2 Analyse du terme correctif

$$C_{orr} = \left( -\frac{\alpha_l}{\alpha_g} \frac{\partial U_{l,j}}{\partial x_j} + \frac{U_{g,j} - U_{l,j}}{\alpha_g} \frac{\partial \alpha_g}{\partial x_j} \right) \quad (4.59)$$

Dans le cas où  $\alpha_g \gg \alpha_l$ , c'est-à-dire dans les zones peu chargées, et où les vitesses de gaz et de liquide sont comparables ou évoluent spatialement de façon comparable, le terme correctif est négligeable.

Dans le cas où  $\alpha_l \gg \alpha_g$ , c'est-à-dire dans les zones chargées, et où les vitesses de gaz et de liquide sont comparables ou évoluent spatialement de façon comparable, le terme correctif n'est plus négligeable.

Le cas des sprays type Diesel ou essence correspond à un cas où  $\alpha_l$  et  $\alpha_g$  sont du même ordre de grandeur et où les gradients de fraction volumique et de vitesse sont très importants. Dans ce cas, le terme correctif ne peut pas être négligé *a priori*.

Comme nous allons le voir dans le chapitre 6, la méthodologie de calcul proposée dans cette thèse consiste à initier le calcul non pas à la sortie de l'injecteur mais en peu plus en aval dans une zone moins dense où il y a au moins un ordre de grandeur entre  $\alpha_g$  et  $\alpha_l$ . Ainsi les effets d'une forte fraction volumique de liquide sont fortement réduits. L'intérêt est multiple. D'une part, cela permet en première approximation d'éliminer le terme correctif (Eq. 4.59) et ne pas avoir à prendre en compte les effets de volume sur la phase gazeuse. D'autre part cela évite un couplage acoustique fort entre les deux phases que la prise en compte de  $\alpha_g \neq 1$  implique. Ceci est crucial, en particulier, pour les conditions limites de type NSCBC (Poinsot and Lele 1992) utilisées dans AVBP. En effet, le fait de prendre en compte la fraction volumique de gaz (et donc celle de liquide) dans les équations de conservation change la nature des ondes caractéristiques dont l'écriture fait alors intervenir des termes couplés.

Ainsi dans toute la suite de ce travail, on utilise les équations diluées. Il a été vérifié que l'erreur associée en zone proche de la condition limite est négligeable par rapport au volume global de spray.

## Chapitre 5

# Aspects numériques

Un des objectifs de cette thèse est de mettre en place tous les outils numériques indispensables à la simulation aux grandes échelles des moteurs à injection directe. Il faut donc s'attacher à la résolution numérique (fortes vitesses et forts gradients) en sortie d'injecteur et dans le développement du spray. Enfin, le spray évoluant dans un volume non constant, il faut également s'intéresser aux aspects de maillage mobile. Tous ces points ont été abordés dans le cadre de cette thèse permettant d'élaborer des solutions partielles qui ont permis d'améliorer la robustesse du code et sa précision, et de réaliser des simulations d'injection Diesel dans des conditions réalistes (voir chapitre 8). Ces modifications ont enfin permis de réaliser un calcul complet admission/injection/combustion avec maillage mobile sur une géométrie industrielle.

Dans ce chapitre, le code de calcul est d'abord brièvement présenté dans le but d'explicitier les adaptations numériques qui sont développées par la suite.

Les problèmes numériques associés à l'injection sont spécifiquement traités au chapitre 6.

### 5.1 Le code AVBP

AVBP est un code de calcul développé conjointement par le CERFACS<sup>1</sup> et l'IFP<sup>2</sup>. Ce code a été développé dans le but de disposer d'un solveur LES parallèle haute performance pour le calcul de géométries industrielles. Il est capable de résoudre les équations de Navier-Stokes sur des maillages non-structurés et hybrides et donc de simuler des écoulements complexes dans des géométries réelles. Destiné tout d'abord aux écoulements externes stationnaires non-réactifs, il a évolué pour répondre aux besoins accrus de simulation d'écoulements internes instationnaires diphasiques réactifs. Une présentation plus détaillée du code de calcul et des schémas numériques est proposée en Annexe II. Une évaluation détaillée des méthodes numériques utilisées dans AVBP ainsi que leur intérêt dans une approche LES sont proposés

---

<sup>1</sup>Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée au Calcul Scientifique - [www.cerfacs.fr](http://www.cerfacs.fr)

<sup>2</sup>[www.ifp.fr](http://www.ifp.fr)

par Lamarque (2007).

Les deux schémas utilisés dans cette thèse sont les schémas de type volumes-finis Lax-Wendroff à une étape et le schéma éléments finis de type Galerkin à deux étapes spécialement développé pour AVBP nommé TTGC (Colin and Rudgyard 2000). Le schéma TTGC est d'ordre 3 en espace et en temps et se caractérise par une faible dissipation des plus petites échelles résolues. Le schéma TTGC a été utilisé pour tous les calculs de cette thèse sauf pour le calcul complet du cycle moteur (chapitre 8) utilisant le schéma Lax-Wendroff.

L'intégration temporelle est explicite pour tous les schémas numériques d'AVBP. Tous les schémas convectifs ont une condition de stabilité de type Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) basée sur les ondes les plus rapides de l'écoulement, c'est-à-dire acoustiques en compressible :

$$\Delta t < \text{CFL} \frac{\min(\Delta x)}{\max|\mathbf{u}| + c} \quad (5.1)$$

où  $c$  est la vitesse du son. La valeur du CFL maximum dépend du type de schéma utilisé. Une limite sur les pas de temps chimique et diffusif est également introduite dans le cas de simulations réactives multi-espèces.

Pour l'intégration des termes spatiaux, la méthode *cell-vertex* est utilisée. Elle consiste à stocker les variables conservatives aux nœuds et à résoudre les équations de conservation à la cellule de maillage. L'intérêt de cette méthode est une compacité maximale et une écriture facilement parallélisable.

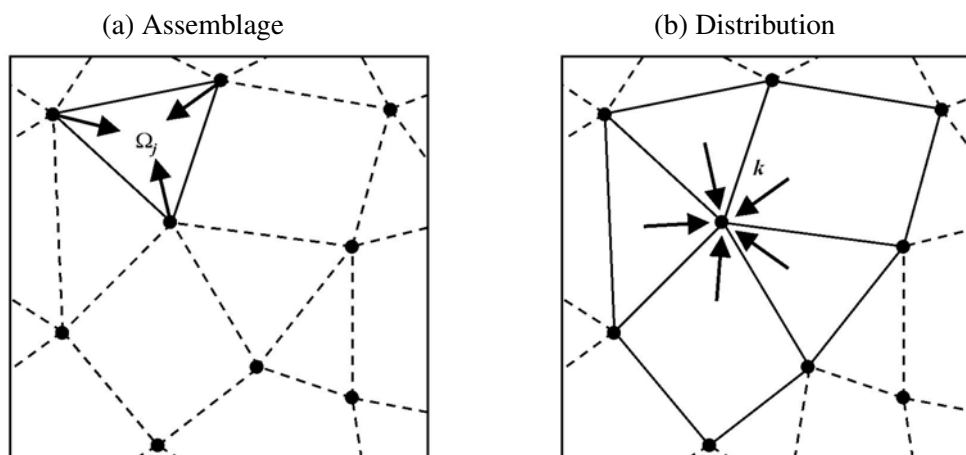


FIG. 5.1 – Principe de la méthode cell-vertex, en deux étapes : assemblage et distribution. D'après Moureau (2004) .

Cette méthode consiste en deux étapes illustrées par la figure (5.1) :

- assemblage (ou gather) : les variables conservatives stockées aux nœuds sont stockées à la cellule en utilisant la connectivité cellule-nœuds.
- distribution (ou scatter) : les résidus calculés sur le volume de contrôle de la cellule sont redistribués aux volumes de contrôle centrés aux nœuds.

La méthode cell-vertex permet d'écrire facilement des opérateurs du premier et du second ordre pour des maillages non-structurés. L'opérateur du premier ordre est obtenu en calculant un gradient à la cellule après la phase d'assemblage, et la distribution est ensuite effectuée en faisant une moyenne volumique. Pour obtenir l'opérateur du second ordre, il suffit de remplacer la moyenne volumique de l'opérateur du premier ordre par une intégration surfacique sur le bord du volume de contrôle au nœud. Les défauts de cette méthode sont le temps de calcul pour les diverses opérations gather-scatter ainsi que la non-dissipation d'erreur numérique haute fréquence. Dès lors cette méthode implique l'utilisation de termes de diffusion artificielle appelée viscosité artificielle pour stabiliser les calculs.

## 5.2 Mouvement de maillage

La simulation dans les moteurs à piston implique la gestion des parois mobiles dues au mouvement du piston et des soupapes. Le solveur doit donc être capable de prendre en compte ce déplacement. La solution numérique retenue par [Moureau 2004](#) pendant sa thèse est d'utiliser la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian, [Hirt et al. 1974](#)) pour laquelle chaque nœud du maillage a une vitesse de déplacement propre. La méthode ALE est utilisée dans la plupart des codes moteurs RANS. Un des intérêts de cette méthode est que les bords du domaine coïncident à chaque instant avec les nœuds du maillage, ce qui simplifie le traitement des conditions aux limites. En revanche, les schémas convectifs doivent prendre en compte le déplacement et la déformation des volumes d'intégration ([Moureau et al. 2004](#)). La méthode ALE n'ayant été implantée dans AVBP que pour l'aérodynamique, la modification des schémas numériques n'a été appliquée qu'aux équations du gaz. Dans le but de réaliser la simulation complète d'un cycle moteur en injection directe, il faut étendre cette modification aux équations du liquide. Il s'agit ici de l'extension à la phase liquide des principes de dérivation des schémas avec mouvement de maillage utilisés pour le gaz et rappelés ci-dessous.

Dans la méthode ALE, les volumes de contrôle servant à l'intégration et la dérivation des équations de conservation (du gaz et du liquide), ont une vitesse arbitraire  $\vec{X}(x, t)$ . Pour le calcul en moteur à piston, cette vitesse est soit une vitesse analytique définie par l'utilisateur soit une vitesse recalculée en externe par un autre solveur à partir de la vitesse du piston et des soupapes. Ce solveur recalcule alors la vitesse  $\vec{X}_k(t)$  de chaque nœud avec un critère sur l'optimisation de l'uniformité des mailles.

D'après le théorème de Leibniz, la dérivé de l'intégration volumique d'une quantité  $\psi(x, t)$  sur un volume de contrôle  $V(t)$  se déplaçant à la vitesse  $\vec{X}(x, t)$  peut s'écrire :

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \psi(x, t) dV = \int_{V(t)} \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{X} \psi) \right) dV \quad (5.2)$$

Pour un champ  $\psi$  uniforme en espace et en temps, ce théorème conduit à la loi de conservation géométrique

(LCG) entre les surfaces et les volumes :

$$\frac{d}{dt}V(t)dV = \int_{V(t)} \nabla \cdot (\vec{X})dV = \int_{\partial V(t)} \vec{X} \cdot \vec{n}dA \quad (5.3)$$

où  $\vec{n}$  représente la normale extérieure de l'élément de surface  $dA$  et  $\partial V(t)$  est la surface du volume  $V(t)$ . Le non respect de cette loi, tant au niveau continu que discret, peut entraîner l'apparition de perturbations physiques.

Par exemple pour un schéma de type Lax-Wendroff, l'application de la méthode ALE entraîne les modifications explicitées ci-dessous :

Les schémas volumes finis à une étape sur maillage fixe se mettent sous la forme :

$$\frac{\mathbf{w}_k^{n+1} - \mathbf{w}_k^n}{\Delta t} = -C_k(\mathbf{w}^n) + D_k(\mathbf{w}^n) + S_k(\mathbf{w}^n) \quad (5.4)$$

où  $\mathbf{w}_k^n$  est le vecteur des variables conservatives au nœud  $k$  et à l'instant  $t^n$ . Les opérateurs discrets  $C_k$ ,  $D_k$  et  $S_k$  sont respectivement les opérateurs de convection, de diffusion (moléculaire et turbulente), et les termes sources. Pour obtenir une expression équivalente sur maillage mobile, il faut repartir des équations de conservation (du gaz et du liquide) sous forme locale et les intégrer sur les volumes de contrôle aux nœuds  $V_k(t)$  pendant le pas de temps  $\Delta t$ . Comme les volumes se déforment au cours du temps, on ne peut pas séparer ces deux intégrations. On obtient le schéma convectif discret (en espace et en temps) :

$$\frac{V_k^{n+1}\mathbf{w}_k^{n+1} - V_k^n\mathbf{w}_k^n}{V_k^{n+1/2}\Delta t} = -C_k(\mathbf{w}^n) + D_k(\mathbf{w}^n) + S_k(\mathbf{w}^n) \quad (5.5)$$

où les termes convectifs, diffusifs et les termes sources ne sont pas identiques aux expressions sur maillage fixe. On note dorénavant le résidu des flux  $\mathbf{R}_k = C_k(\mathbf{w}^n) - D_k(\mathbf{w}^n)$ . Le vecteur  $\mathbf{w}_k^{n+1}$  peut se réécrire :

$$\mathbf{w}_k^{n+1} = \mathbf{w}_k^n - \Delta t \frac{V_k^{n+1/2}}{V_k^{n+1}} \left( \mathbf{R}_k + \underbrace{\frac{V_k^{n+1} - V_k^n}{V_k^{n+1/2}\Delta t} \mathbf{w}_k^n}_a \right) \quad (5.6)$$

Pour le résidu des flux  $\mathbf{R}_k$  il faut, par rapport au maillage fixe, prendre en compte le flux induit par le déplacement des nœuds. On donne ci-dessous l'expression de ce terme dans le cas du schémas Lax-



Wendroff volume fini ALE :

$$\mathbf{R}_k = \frac{1}{V_k^{n+\frac{1}{2}}} \sum_{j|k \in \Omega_j} V_{\Omega_j}^{n+\frac{1}{2}} \left( D_{k,\Omega_j}^{(1)} \mathbf{R}_{\Omega_j} + D_{k,\Omega_j}^{(2)} \left[ \mathbf{R}_{\Omega_j} + \mathbf{R}_{\Omega_j}^c \right] \right) \quad (5.7)$$

$$D_{k,\Omega_j}^{(1)} = \frac{1}{n_v} \quad (5.8)$$

$$D_{k,\Omega_j}^{(2)} = \frac{1}{2N_d} \frac{\Delta t_{\Omega_j}}{V_{\Omega_j}^{n+\frac{1}{2}}} \left[ \underbrace{\vec{A}_{\Omega_j}^n - \vec{X}_{\Omega_j}}_b \right] \cdot \vec{dS}_k^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.9)$$

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d V_{\Omega_j}^{n+\frac{1}{2}}} \sum_{k|k \in \Omega_j} \left( \underbrace{\vec{F}_k^n - \mathbf{w}_k^n \vec{X}_k}_c \right) \cdot \vec{dS}_k^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.10)$$

$$\mathbf{R}_{\Omega_j}^c = \mathbf{w}_{\Omega_j}^n \frac{1}{N_d V_{\Omega_j}^{n+\frac{1}{2}}} \left( \sum_{k|k \in \Omega_j} \vec{X}_k \cdot \vec{dS}_k^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (5.11)$$

où  $n_v$  est le nombre de sommet de l'élément de volume  $\Omega_j$ ,  $N_d$  est le nombre de dimensions et  $\vec{dS}_k$  est la normale au nœud  $k$ .  $D_{k,\Omega_j}^{(1)}$  et  $D_{k,\Omega_j}^{(2)}$  sont respectivement les matrices de distribution du premier et du deuxième ordre. Les résidus du premier et du deuxième ordre sont respectivement  $\mathbf{R}_{\Omega_j}$  et  $\left( \mathbf{R}_{\Omega_j} + \mathbf{R}_{\Omega_j}^c \right)$ .  $\vec{F}_k^n$  sont les flux et  $\vec{A}_{\Omega_j}^n$  les jacobiniennes des équations de Navier-Stokes. Comme le schéma est centré, tous les termes géométriques, c'est-à-dire les normales et les volumes, sont pris au demi pas de temps  $n + \frac{1}{2}$ .

Comparé au schéma standard Lax-Wendroff sur maillage fixe, des corrections ALE apparaissent :

1. les termes  $a$  et  $\mathbf{R}_{\Omega_j}^c$  proviennent de la variation du volume de contrôle au nœud.
2.  $b$  et  $c$  sont des termes additionnels dus aux mouvements des nœuds.  $b$  est un terme du deuxième ordre correspondant à la jacobienne de translation alors que  $c$  est un terme du premier ordre correspondant au flux de déplacement de grille.

Des termes correctifs de dilatation et de translation sont également présents dans les schémas centrés éléments-finis comme TTGC. Le lecteur intéressé pourra consulter (Moureau et al. 2004).

### 5.3 Opérateur de diffusion

Les équations de Navier-Stokes, des espèces ou d'autres grandeurs transportées dans AVBP contiennent des termes de diffusion qui peuvent s'écrire de manière générale :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{v} \nabla u) \quad (5.12)$$

Le terme de diffusion sur le membre de droite de l'équation (5.12) peut être discrétisé de différentes manières. Les opérateurs de discrétisation utilisés dans AVBP pour les termes diffusifs de la phase gazeuse (diffusivité laminaire et turbulente) sont de type "2 $\Delta$ " basé sur la méthode de Galerkin ou "4 $\Delta$ " de

type *cell-vertex*. Le terme “ $2\Delta$ ” signifie que l’opérateur au noeud  $j$  n’a besoin que des informations aux noeuds des cellules adjacentes au noeud  $j$ . Le stencil est donc de  $2\Delta$  où  $\Delta$  est la longueur caractéristique d’une cellule. Même si aucun de ces deux types d’opérateurs ne donne entièrement satisfaction aussi bien pour le gaz que pour le liquide, l’opérateur “ $4\Delta$ ” est jugé le moins satisfaisant pour les simulations de sprays. D’une part le temps de calcul est long puisque le stencil est de  $4\Delta$  et d’autre part ce schéma est très peu dissipatif en particulier pour les petites échelles. Les instabilités numériques appelées *wiggles*, qui sont des oscillations noeud à noeud (longueur d’onde de  $2\Delta$ ) omniprésentes dans une simulation numérique ne sont pas dissipées. Or ces instabilités numériques peuvent faire diverger les calculs. De plus, les spectres d’énergie cinétique présentent une accumulation d’énergie non-physique dans les petites échelles (figure 5.2). L’opérateur “ $2\Delta$ ” est plus dissipatif pour les petites échelles que l’opérateur  $4\Delta$  et permet des calculs plus stables.

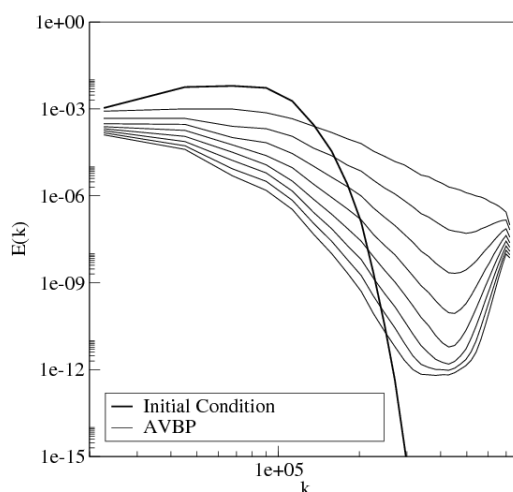


FIG. 5.2 – Spectres d’énergie typiques obtenus en DNS de turbulence homogène isotrope avec l’opérateur de diffusion “ $4\Delta$ ”. D’après le Handbook AVBP

Étant donnée la forte sensibilité des équations de la phase liquide aux instabilités numériques, notamment à cause des très forts gradients transportés, l’opérateur de type “ $2\Delta$ ” a été implémenté pour le liquide.

Cet opérateur s’applique aux termes diffusifs de l’équation de quantité de mouvement que sont la diffusion par mouvement décorrélé ainsi que la diffusion par la turbulence du liquide. Cet opérateur s’applique aussi au terme de diffusion dans l’équation de transport de l’énergie décorrélée. Il sera utilisé pour tous les calculs présentés dans ce manuscrit.

## 5.4 Viscosité artificielle pour la phase liquide

Les schémas de convection d'AVBP sont centrés et ont par conséquent des difficultés à transporter des forts gradients et génèrent des instabilités numériques appelées *wiggles*. L'utilisation de ce type de schéma impose l'ajout de diffusion artificielle appelée viscosité artificielle. Afin d'améliorer la prédictivité de la LES de spray ainsi que leur robustesse, un travail sur la viscosité artificielle appliquée à la phase liquide a été effectué. Ce travail a permis de limiter la dissipation numérique tout en permettant d'assurer des calculs stables.

### 5.4.1 Problématique des équations bi-fluides

L'équation de quantité de mouvement pour la phase dispersée dans AVBP sans couplage, ni énergie décorrélée, ni modélisation de sous-maille ou forces extérieures est réduite à l'équation (5.13) :

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l U_{i,l})}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_l \rho_l U_{i,l} U_{j,l})}{\partial x_j} = 0 \quad (5.13)$$

Cette équation est similaire à l'équation de Burgers non visqueuse si  $U_l$  n'est pas constant et entraîne par conséquent des problèmes de stabilité avec apparition de discontinuités (onde de chocs) difficiles à traiter numériquement donc des problèmes numériques. On voit bien ici une différence essentielle avec la phase porteuse qui possède une pression limitant les chocs ainsi qu'une viscosité laminaire augmentant le caractère diffusif. Ce type de comportement peut apparaître malgré tout pour la phase gazeuse pour les écoulements à forts Reynolds où par définition, la diffusion laminaire est faible comparée à l'inertie. Pour la phase dispersée, la modélisation du tenseur des vitesses décorrélées ainsi que le tenseur de sous-maille introduit des termes diffusifs dans l'équation (5.13) qui contribuent à stabiliser le calcul. Cependant, dans certains cas, par exemple quand le mouvement décorrélé est faible, ces termes diffusifs ne sont pas suffisants et les instabilités apparaissent. La force de traînée peut aussi jouer un rôle pour des faibles nombres de Stokes puisque les gouttes subissent indirectement les termes diffusifs de la phase gazeuse. Les propriétés de la phase liquide, les spécificités des schémas de convection d'AVBP ainsi que les spécificités de l'injection directe avec des forts gradients de vitesse, poussent à l'utilisation de viscosité artificielle pour les simulations de spray.

### 5.4.2 Comment et où appliquer la viscosité artificielle ?

La viscosité artificielle dans AVBP a été à l'origine introduite pour la phase gazeuse et a été étendue à la phase liquide par Kaufmann (2004) et Riber (2007). Le but de la viscosité artificielle est d'assurer une convergence du code en utilisant de la dissipation numérique pour limiter les très forts gradients ou bien les oscillations haute fréquence. L'idée remonte aux travaux de von Neumann and Richtmeyer (1950)

pour le traitement des ondes de choc. Toute la difficulté dans l'ajout de viscosité artificielle consiste à bien calibrer le niveau de viscosité à appliquer pour ne pas pénaliser la précision du calcul. Il faut aussi différencier les instabilités physiques et les instabilités numériques pour appliquer la viscosité artificielle au bon endroit.

Ainsi, l'opérateur de viscosité artificielle n'est jamais appliqué sur tout le domaine mais des senseurs sont utilisés. Les senseurs sont des variables normées, définies au cellule, comprises entre 0 et 1, indicatrices des zones de fortes variations locales d'une variable analysée. Le senseur vaut 0 quand aucune viscosité artificielle n'est nécessaire et 1 dans le cas contraire. La viscosité artificielle s'applique de deux façons, soit avec un opérateur du deuxième ordre, soit avec un opérateur du quatrième ordre :

- L'opérateur du deuxième ordre agit comme une viscosité classique. Il diffuse les gradients et introduit de la diffusion artificielle.
- L'opérateur du quatrième ordre agit comme un bi-Laplacien et élimine principalement les hautes fréquences. On l'appelle opérateur d'hyperdiffusion artificielle. Cet opérateur s'applique lorsque le premier opérateur ne s'applique pas.

L'idée de combiner ces deux opérateurs revient à [Jameson et al. \(1981\)](#). Le senseur est obtenu par comparaison des gradients d'une grandeur analysée sur différents stencils. Dans le cas où ces évaluations sont identiques, la variable est localement linéaire et le senseur vaut 0. Dans le cas contraire, la variable présente des non-linéarités et le senseur s'active. De cette manière l'ordre de convergence du schéma est conservé. La principale difficulté consiste à bien calibrer le senseur pour qu'il ne se déclenche pas sur des instabilités physiques.

### 5.4.3 Les différents senseurs de la phase liquide dans AVBP

Pour la phase gazeuse les senseurs sont basés sur la pression ou l'énergie totale ainsi que sur les fractions massiques des espèces. Pour la phase liquide, le problème est plus compliqué puisqu'il n'y a pas de pression ou d'énergie totale telle que l'on peut en avoir pour le gaz. Certains senseurs analysent donc toutes les variables transportées de la phase liquide alors que d'autres comme le senseur proposé dans cette thèse ne se concentrent que sur certaines variables.

Pour la phase liquide, deux types de senseurs sont utilisés :

- Un senseur  $\zeta_{extr}$  basé sur les extrêma : ce senseur vérifie si les variables de nombre de gouttes, de fraction volumique de liquide et le diamètre des gouttes ne prennent pas de valeur non physique. Ce senseur est nécessaire du fait que les schémas ne conservent pas les valeurs extrêmes d'une variable et qu'il est possible d'avoir par exemple des fractions volumiques négatives ou supérieures à 1.
- Un senseur  $\zeta_{tpf}$  basé sur l'analyse de gradients et dont le but est de repérer les instabilités numériques. Chaque senseur est évalué à la cellule  $\Omega_j$ , et le maximum de ces deux senseurs est utilisé.

Différentes formulations du senseur  $\zeta_{tpf}$  sont utilisées dans AVBP et présentées ci-dessous.

### Le senseur "Jameson-Riber"

Le senseur 'Jameson' utilisé sur la phase gazeuse a été adapté à la phase liquide par **Riber (2007)**. Ce senseur  $\zeta_{t_{pf},\Omega_j}^{JR}$  est en fait le maximum de tous les senseurs appliqués aux variables transportées de la phase liquide. Ainsi :

$$\zeta_{t_{pf},\Omega_j}^{JR} = \max [\zeta_{t_{pf},\Omega_j}(\alpha_l), \zeta_{t_{pf},\Omega_j}(u_l), \zeta_{t_{pf},\Omega_j}(\delta\theta_l), \zeta_{t_{pf},\Omega_j}(h_l), \zeta_{t_{pf},\Omega_j}(n_l)] \quad (5.14)$$

Pour chaque variable de la phase dispersée  $S_{t_{pf}}$ , deux estimations du gradient à la cellule sont utilisées :

$$\Delta_1^k = S_{t_{pf},\Omega_j} - S_{t_{pf},k} \quad \text{et} \quad \Delta_2^k = (\vec{\nabla} S_{t_{pf}})_k \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \quad (5.15)$$

$S_{t_{pf},\Omega_j}$  est la valeur à la cellule alors que  $S_{t_{pf},k}$  est la valeur au noeud.  $(\vec{\nabla} S_{t_{pf}})_k$  est le gradient de  $S_{t_{pf}}$  au noeud  $k$  calculé dans AVBP.  $\Delta_1^k$  représente la variation de la quantité  $S_{t_{pf}}$  dans la cellule alors que  $\Delta_2^k$  représente la variation de  $S_{t_{pf}}$  sur un stencil plus large puisqu'il utilise les cellules voisines au noeud  $k$ .

Ces estimations permettent de définir le senseur de Jameson appliqué à la variable  $S_{t_{pf}}$  :

$$\zeta_{\Omega_j}^j(S_{t_{pf}}) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_{t_{pf},k}|} \quad (5.16)$$

Le terme  $|S_{t_{pf},k}|$  au dénominateur est une valeur de référence pour la normalisation. Dans le cas où le champ de  $S_{t_{pf}}$  est constant et que  $\Delta_1^k$  et  $\Delta_2^k$  sont nuls, le senseur est défini. L'adaptation réalisée par **Riber (2007)** consiste à utiliser des senseurs de 'Jameson' pour toutes les variables de la phase liquide avec des valeurs de normalisation adaptées aux spécificités de la phase liquide.

Les senseurs pour chaque variable sont explicités ci-dessous.

- fraction volumique

$$\zeta_{t_{pf},\Omega_j}(\alpha_l) = \max_{k \in \Omega_j} \left( \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{(|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l \alpha_{l,k}|)} \right)^2 \quad (5.17)$$

- vitesse

$$\zeta_{t_{pf},\Omega_j}(u_l) = \max_{k \in \Omega_j} \left( \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + \rho_l c_{\Omega_j}} \right) \quad (5.18)$$

où  $c_{\Omega_j}$  est une mesure locale de la vitesse caractéristique évaluée par :  $c_{\Omega_j} = V_{\Omega_j}^{1/3} / \Delta t$ , où  $V_{\Omega_j}$  représente le volume de la cellule. Les fluctuations nœud à nœud sur la vitesse sont faibles par rapport à cette vitesse locale sauf si de fortes oscillations apparaissent. Par conséquent le senseur  $\zeta_{t_{pf},\Omega_j}(u_l)$  reste petit sauf si de forts gradient locaux de vitesse sont détectés.

- RUE

$$\zeta_{t,pf,\Omega_j}(\delta\theta_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l \alpha_{l,k} \delta\theta_{l,k}|} \quad (5.19)$$

- enthalpie

$$\zeta_{t,pf,\Omega_j}(h_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l \alpha_{l,k} h_{l,k}|} \quad (5.20)$$

- densité en nombre de gouttes

$$\zeta_{t,pf,\Omega_j}(n_l) = \left( \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{(|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + n_{l,k})} \right)^2 \quad (5.21)$$

Le principal défaut de ce senseur est qu'il s'active très souvent puisqu'il est calculé sur toutes les variables. De plus le senseur de Jameson a été conçu pour des écoulements aérodynamiques stationnaires et a tendance à se déclencher beaucoup trop souvent dans des simulations LES.

### Le senseur de "Colin"

Devant les limitations du senseur de Jameson, [Colin \(2000\)](#) a proposé un nouveau senseur ne se déclenchant pas quand l'écoulement est suffisamment résolu et se déclenchant fortement pour les zones de fortes non-linéarités. Le senseur de Colin pour la phase liquide est identique à la formulation de Colin pour la phase porteuse. Il s'applique à toutes les variables transportées de la phase liquide. Ce senseur est défini par :

$$\zeta_{t,pf,\Omega_j}^C = \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( \frac{\Psi - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( \frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (5.22)$$

avec :

$$\Psi = \max_{k \in \Omega_j} \left( 0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + \varepsilon_1 S_{t,pf,k}} \zeta_k^J \right) \quad (5.23)$$

$$\zeta_k^J = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + S_{t,pf,k}} \quad (5.24)$$

$$\Delta^k = |\Delta_1^k - \Delta_2^k| - \varepsilon^k \max \left( |\Delta_1^k|, |\Delta_2^k| \right) \quad (5.25)$$

$$\varepsilon^k = \varepsilon_2 \left( 1 - \varepsilon_3 \frac{\max \left( |\Delta_1^k|, |\Delta_2^k| \right)}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + S_{t,pf,k}} \right) \quad (5.26)$$

Les valeurs numériques utilisées dans AVBP ont été fixées par [Colin \(2000\)](#) :

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \quad \delta = 1.10^{-2} \quad \varepsilon_1 = 1.10^{-2} \quad \varepsilon_2 = 0.95 \quad \varepsilon_3 = 0.5 \quad (5.27)$$

### Le senseur de "Colin-Martinez"

Ce senseur est adapté de la formulation du senseur Colin. Il a été créé et utilisé dans cette thèse spécialement pour le cas de l'injection directe. La principale différence avec le senseur classique de Colin est qu'au lieu d'utiliser une valeur au noeud pour la normalisation, on utilise une valeur moyenne à la cellule. De plus les variables utilisés pour l'identification des instabilités numériques ne sont pas les mêmes. Comme le senseur détecte un problème déjà existant, donc *a posteriori*, la valeur de normalisation au noeud peut être extrême à cause de ce problème numérique. Ainsi, si la valeur est très grande, le senseur est sous estimé. Inversement si la valeur est petite, le senseur est sur-estimé. De plus une variable comme la fraction volumique de liquide peut varier de plusieurs ordres de grandeur spatialement : prendre une valeur moyenne à la cellule permet d'avoir une valeur de normalisation moins locale et plus représentative du champ. On aurait également pu prendre une valeur encore plus filtrée en augmentant le stencil et en moyennant sur toutes les cellules adjacentes à la cellule  $\Omega_j$ , mais cela aurait entraîné un temps de calcul plus long.

Le senseur est calculé à partir de la fraction volumique et du diamètre des gouttes. Le senseur sur la fraction volumique permet de contrôler la masse de liquide qui subit de forts gradients en simulation de sprays. Le senseur sur le diamètre est crucial dans AVBP car le diamètre est reconstruit à partir de la fraction volumique de liquide et de la densité en nombre par la relation :

$$d = \left( \frac{6\alpha_l}{n_l\pi} \right)^{1/3} \quad (5.28)$$

Si les champs de fraction volumique et de densité en nombre sont strictement proportionnels, alors l'erreur numérique est identique pour ces deux variables et le diamètre reste constant. Dans le cas où ces deux champs ne sont pas proportionnels, ils sont propagés différemment et les erreurs numériques sont différentes. Par exemple si  $\alpha_l$  est constant, l'erreur numérique sur  $n_l$  se répercute directement sur le diamètre. Pour deux champs non constants, les erreurs sur  $\alpha_l$  et  $n_l$  peuvent s'accumuler dans le calcul du diamètre, qui devient un bon indicateur d'erreur numérique.

De plus, analyser le diamètre est intéressant puisqu'il intervient directement dans le calcul des termes d'échanges avec la phase porteuse.

Le senseur final est donc le maximum entre le senseur sur le diamètre et le senseur sur la fraction volumique :

$$\zeta_{t_{pf},\Omega_j}^{CM} = [\zeta_{t_{pf},\Omega_j}(\alpha_l), \zeta_{t_{pf},\Omega_j}(d_l)] \quad (5.29)$$

$$\zeta_{t_{pf},\Omega_j} = \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( \frac{\Psi' - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( \frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (5.30)$$

avec :

- fraction volumique de liquide :

$$\Psi'(\alpha_l) = \max_{k \in \Omega_j} \left( 0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + 5\varepsilon_1 \rho_l \alpha_{l,\Omega_j}} \zeta_k^J(\alpha_l) \right) \quad (5.31)$$

et :

$$\zeta_k^J(\alpha_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + 5\rho_l \alpha_{l,k}} \quad (5.32)$$

- diamètre moyen :

$$\Psi'(d_l) = \max_{k \in \Omega_j} \left( 0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + 2\varepsilon_1 d_{l,\Omega_j}} \zeta_k^J(d_l) \right) \quad (5.33)$$

et :

$$\zeta_k^J(d_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + 2d_{l,k}} \quad (5.34)$$

Les autres paramètres numériques sont identiques à ceux utilisés pour le capteur de Colin classique.

### Exemple de résultat obtenu avec le nouveau capteur

On présente ici les résultats obtenus avec le nouveau capteur 'Colin-Martinez' sur une injection Diesel basse pression. La pression d'injection est de 230 bars avec une pression de 30 bars dans la chambre. Le diamètre de l'injecteur est de  $200\mu m$ . Cette injection correspond au cas de l'injection de Chaves présentée au chapitre III. Le calcul s'effectue sans injection de turbulence afin que les champs se déstabilisent naturellement. La figure (5.3) présente en haut le champ de capteur 'Jameson-Riber' et en bas le champ de capteur 'Colin-Martinez'.

On remarque que le capteur 'Jameson-Riber' s'applique sur toute la périphérie du spray ainsi que sur l'axe. Il s'applique même dans des zones situées à l'extérieur du spray. Ce capteur ne vaut jamais 1 et sature vers 0,75. Globalement sa valeur est comprise entre 0,25 et 0,5. Ce capteur n'est donc pas assez



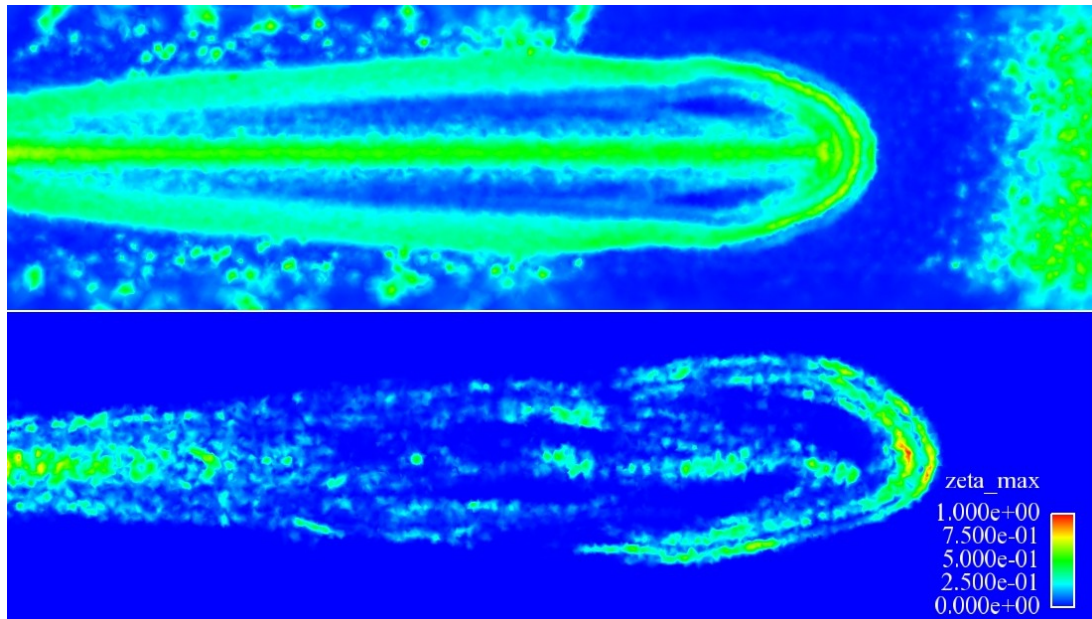


FIG. 5.3 – Comparaison des champs des senseurs 'Jameson-Riber' en haut et 'Colin-Martinez' en bas sur une injection Diesel

ciblé puisqu'il s'active quasiment dans tout le spray et à peu près de la même façon. A l'inverse, le senseur proposé dans cette thèse prend bien les valeurs extrêmes 0 et 1 et s'active de façon plus ciblée puisqu'il y a des zones importantes dans le spray où le senseur ne s'active pas du tout.

De plus, il faut bien réaliser que la solution obtenue avec le senseur 'Colin-Martinez' est beaucoup plus perturbée que celle obtenue avec 'Jameson-Riber', du fait de la viscosité artificielle justement. Le comportement du senseur proposé dans cette thèse est d'autant plus remarquable.

Le nouveau senseur 'Colin-Martinez' est donc utilisé dans tous les calculs présentés dans ce manuscrit.

## 5.5 Conclusion

Le code diphasique AVBP a été adapté pour permettre la simulations aux grandes échelles du cycle moteur à injection directe. Ces modification de modèles physiques et numériques ont été utilisées par [Vié, Martinez, Jay, Benkenida, and Cuenot \(2009\)](#) dans le cas de Turbulence Homogène Isotrope et ont montré de très bons résultats. Elles ne résolvent cependant pas le problème général de la simulation LES diphasique. Le couplage fort entre physique résolue, précision numérique et stabilité numérique démontré dans ce chapitre montre l'importance et la nécessité d'une réflexion à mener sur les méthodes numériques à adopter en LES. Même si les travaux effectués dans cette thèse ont permis une nette amélioration de la stabilité et une nette diminution de la dissipation numérique, des difficultés subsistent encore pour lesquelles de nouveaux schémas numériques robustes sont nécessaires. Ce point est encore un point dur

pour la simulation de spray. Une évaluation détaillée des méthodes numériques utilisées dans AVBP ainsi que leur intérêt et performance dans une approche LES a été faite par [Lamarque \(2007\)](#). Des travaux sont actuellement en cours au Cerfacs pour répondre à ce besoin.





## Chapitre 6

# Condition limite d'injection pour la simulation 3D de spray Diesel. Méthodologie et validation

### 6.1 Introduction

Ce chapitre est tiré de l'article "A model for the injection boundary conditions in the context of 3D Simulation of Diesel Spray : Methodology and Validation" accepté pour publication dans la revue *FUEL* en 2009.

Comme nous l'avons vu en introduction, la physique en sortie d'injecteur est très complexe. L'atomisation primaire, qui est la fragmentation du jet liquide en ligaments et en gouttes, est très difficile à modéliser (Beau 2006; Gorokhovski and Herrmann 2008). La forte dépendance à la géométrie interne de l'injecteur à travers les phénomènes de cavitation ainsi que la forte dépendance aux phénomènes de viscosité et aux tensions de surface de la colonne de liquide font que les modèles d'atomisation primaire sont difficiles à valider. Il faut ajouter à cela que faire des mesures expérimentales est très difficile en sortie d'injecteur. Par conséquent les modèles sont validés *a posteriori* et de manière indirecte en analysant des pénétrations de spray ou parfois des distributions de tailles de gouttes.

Étant donnée la forte charge ( $\alpha_l = 1$ ) en sortie d'injecteur et les vitesses très élevées du spray (de l'ordre de  $400m.s^{-1}$  à  $600m.s^{-1}$  en Diesel), le code de calcul doit gérer, en Eulérien, de très forts gradients de quantité de mouvement pour la phase liquide et sa robustesse est mise à rude épreuve.

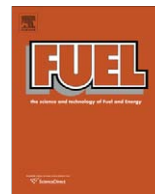
Une autre contrainte concerne les échelles mises en jeu à la sortie de l'injecteur. Les injecteurs de type Diesel actuels ont un diamètre de sortie de l'ordre de  $100\mu m$ . Pour résoudre convenablement la dynamique du spray en sortie d'injecteur, il faudrait entre 5 et 10 points dans ce diamètre soit des tailles de maille de l'ordre de  $10\mu m$  à  $20\mu m$ , bien en dessous de la limite raisonnable pour un calcul moteur. Une

taille de maille trop petite conduit à des temps de calcul prohibitifs d'une part parce que le pas de temps devient très faible et d'autre part parce que le nombre de mailles augmente.

Devant la limitation intrinsèque du modèle bi-fluide utilisé (hypothèse d'écoulement dilué et de phase dispersée), la complexité de la physique du spray en sortie d'injecteur ainsi que la difficulté numérique associée, nous avons choisi de ne pas calculer cette zone et de placer une condition limite décalée de la sortie de l'injecteur. La principale difficulté consiste à modéliser des profils de vitesse de gouttes, de fraction volumique de liquide et de taille de gouttes sur cette condition limite. Pour ce faire un modèle d'injecteur est utilisé et combiné à des bilans de masse et de quantité de mouvement permettant de décrire ces profils, supposés Gaussiens. La condition limite obtenue appelée DITurBC est ensuite validée sur diverses données expérimentales en proche injecteur.

L'article est présenté ci-après dans sa version définitive. Il est complété à la fin de ce chapitre par quelques considérations supplémentaires.

## **6.2 FUEL 2009 - A model for the injection boundary conditions in the context of 3D Simulation of Diesel Spray : Methodology and Validation**



# A model for the injection boundary conditions in the context of 3D simulation of Diesel Spray: Methodology and validation

Lionel Martinez<sup>a,\*</sup>, Adlène Benkenida<sup>a</sup>, Bénédicte Cuenot<sup>b</sup>

<sup>a</sup> IFP, 1 et 4 avenue Bois Préau, 92852 Rueil Malmaison Cedex, France

<sup>b</sup> CERFACS, 4 avenue G. Coriolis, 31055 Toulouse Cedex 01, France

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 16 May 2008

Received in revised form 19 May 2009

Accepted 11 June 2009

Available online 1 July 2009

### Keywords:

Boundary condition

Spray

Large Eddy Simulation (LES)

Modelling

Diesel injection

## ABSTRACT

Downstream Inflow Turbulent Boundary Conditions (DITurBC) are presented for the Eulerian–Eulerian Large Eddy Simulation (LES) or Reynolds Average Navier–Stokes (RANS) simulation of Diesel Sprays. These boundary conditions initiate the spray physics close to the nozzle exit, which avoids the difficulties linked to the 3D simulation of cavitation, primary break-up and turbulence in the near-nozzle region. An injector model is combined with mass and axial momentum conservation equations to obtain mean profiles of velocity, volume fraction and droplet diameter at a given distance downstream from the nozzle exit. In order to take into account the unsteadiness of the flow, velocity fluctuations are added to the mean profile. These boundary conditions are assessed by comparison with existing data on injection velocity, spray angle and velocity profiles from numerous experiments.

© 2009 Elsevier Ltd. All rights reserved.

## 1. Introduction

Car manufacturers are facing increasingly severe regulations on pollutant emissions and fuel consumption. To respect these regulations, new combustion concepts in Internal Combustion (IC) Engines are being developed. The HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) combustion [1,2] represents one of these concepts. Although it has shown a great potential, it still requires a comprehensive work to allow a better understanding, especially with respect to cyclic variabilities which can appear in some operating conditions. These variabilities can have a strong effect on fuel consumption and pollutants as shown by Ozdor et al. [3]. The non-deterministic character of the turbulence is one of the phenomena leading to the cyclic variability. It corresponds to the microscopic events that can influence the instantaneous velocity field and the local mixture leading to different heat release, pollutant levels and engine work from cycle to cycle.

Computational Fluid Dynamics (CFD) is a helpful tool for studying such issues. The RANS (Reynolds Averaged Navier–Stokes) approach [4] is commonly used in CFD to perform 3D simulations [5]. However, although it is characterised by reasonable computational costs, it does not allow the study of the origins of cyclic variabilities: RANS calculation of a given engine operation point represents the statistical average of many cycles at this point.

Large Eddy Simulation (LES) seems to be better adapted for such studies, as one LES of a given engine operation point corresponds to one individual engine cycle, computing local and instantaneous filtered properties [6]. LES has demonstrated its capabilities in many configurations [7,8] and in particular in multi-cycle simulation of IC engine [9,10]. Moreover, due to its potential to resolve large scale vortices and so to predict the interaction between drops and air (carrier phase), LES is also of great interest for spray simulations. Indeed, knowing the level of turbulence intensity generated by the spray as well as the composition of the gas mixture is of great importance for understanding and modelling combustion in IC engines.

In this work, an Eulerian method is used for the liquid phase and preferred to the Lagrangian approaches which are commonly used in CFD. Among all limitations [11–13], one of the main drawback of Lagrangian methods is that a high particle number density is needed to achieve a satisfactory accuracy for LES. This leads to a high computational cost that is not relevant in industrial applications. This may be overcome by parallelisation but this is still delicate today, mainly due to load imbalance when particles concentrate in some sub-domains, i.e. processors.

The main difficulty in the simulation of a Diesel Spray is the complexity of the physics at the nozzle exit for both the liquid and gas phases. This complexity leads to important difficulties for the modelling and the experimental validation.

For example, the physics at the nozzle exit is strongly linked to the behavior of the liquid flow inside the injector. Cavitation may occur, depending on the injector geometry [14] and the flow, and

\* Corresponding author. Tel.: +33 1 47 52 5309; fax: +33 1 47 52 7068.

E-mail address: [lionel.martinez@ifp.fr](mailto:lionel.martinez@ifp.fr) (L. Martinez).

has strong influence on the spray velocity, angle and atomisation [15–17]. Furthermore, due to the high speed and high density of the liquid jet, traditional optical methods show limitations for the measurements in the dense liquid spray region. Therefore the primary break-up is difficult to observe experimentally and corresponding models are not easy to validate. In addition, numerical issues arise linked to the high liquid volume fraction and the high velocities (between  $400 \text{ m s}^{-1}$  and  $600 \text{ m s}^{-1}$ ) emphasised by the very small scales of the physics at the nozzle exit. For instance, typical Diesel injectors have diameters ( $D_{exit}$ ) between  $100 \mu\text{m}$  and  $200 \mu\text{m}$ . Consequently, when using LES solvers to compute the turbulent mixing layer at the nozzle exit, one has to increase the spatial resolution. The resulting simulation cost is then prohibitive for industrial applications.

As a result of these difficulties, a methodology is proposed for injection boundary conditions to initiate the spray physics at a given distance, downstream from the nozzle exit. This new Downstream Inflow Turbulent Boundary Conditions (DITurBC) model is presented in the following sections. It has been developed in the context of LES but could be used for RANS simulations.

The paper is organised as follows: Section 2 explains the methodology developed for the initialization of Diesel Sprays in IC engines. The injector model is presented in Section 3 and the resulting profiles from the DITurBC model are depicted in Section 4. The model validation is finally described in the last Section.

## 2. Methodology for the initialisation of sprays in IC engines

### 2.1. Principle and methodology

The model is based on the main assumptions that the spray development does not depend on the phenomena occurring very close to the injector and that all variable profiles can be reconstructed at a certain distance from the knowledge of the injector parameters.

In order to initiate the spray physics downstream from the nozzle exit, an injector model is first used to estimate the properties of the flow at the nozzle exit such as the liquid velocity, the effective exit section and the spray angle. Then based on these results and using conservation equations, the velocities of gas and liquid, the volume fraction and the droplet size profiles are deduced on a plane perpendicular to the spray axis, located at a distance  $Dist$  (typically  $10D_{exit}$ ) downstream from the nozzle exit, called the DITurBC plane (see Fig. 1). These profiles represent the Downstream Inflow Turbulent Boundary Conditions (DITurBC) that may be used to initiate Eulerian–Eulerian LES of sprays.

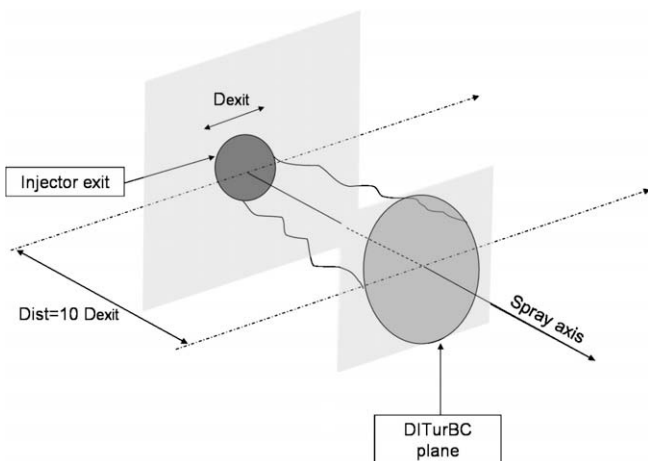


Fig. 1. Schematic representation of the DITurBC model.

### 2.2. Distance to nozzle exit

A review of experimental results concerning the spray structure and break-up mechanisms has been conducted by Smallwood et al. [18] for Diesel injection. According to [18], the spray seems to be completely atomised very close to the nozzle tip. This early disintegration is mainly due to turbulence effects, cavitation and secondary flow inside the injector nozzle [19]. It is however very difficult to define the distance from which the spray is always fully dispersed. Ueki et al. [20] have conducted measurements in the near-nozzle region and concluded that the droplet disintegration occurred from  $2.5D_{exit}$  to  $7.5D_{exit}$ . Nevertheless, these conclusions are not established in every case and the distance of disintegration may depend highly on the injector geometry and on the injection conditions.

Based on these studied and even if the complete disintegration is not established, it is proposed to apply boundary conditions at a distance of 10 nozzle diameters from the injector tip. At this distance, the spray is assumed to be dispersed and composed of spherical droplets. Furthermore, one can suppose following [20–22] that liquid velocity, volume fraction or droplet size mean profiles are Gaussian.

Considering the typical near spray angles of Diesel injectors ( $5\text{--}15^\circ$ ), the spray width, at this distance, is around  $0.8 \text{ mm}$ . With about 10 nodes of the computational grid at the inlet, this leads to a minimum edge length of around  $80 \mu\text{m}$  which represents a good compromise between accuracy and computational cost for a LES of spray in IC engines. Ten nodes at the inlet is the minimum to capture the essential physics at the nozzle exit but not sufficient to capture all the large scales. A greater number of node should be used for a very good accuracy. Nevertheless, this would increase dramatically the computational cost and a compromise of 10 nodes is more suitable.

## 3. Injector model for Diesel-like injection

### 3.1. Principle

Knowing geometrical data of the nozzle, injection conditions and conditions in the combustion chamber, a model is built to predict first the spray velocity at the nozzle exit as well as the spray angle. These quantities will be then used to construct the velocity, volume fraction and droplet size mean profiles at  $Dist = 10D_{exit}$  on the DITurBC plane (see Section 4).

### 3.2. Determination of the velocity at the nozzle exit and the effective section area

The velocity of the liquid jet at the nozzle exit,  $U_{exit}$ , depends on whether the flow inside the injector is cavitating or merely turbulent. To determine the flow regime, the model of Sarre et al. [23] is used.

It is assumed that only two types of flow regimes can occur inside the nozzle (see Fig. 2):

- If the pressure in the *vena contracta*,  $P_{vena}$ , is larger than the saturation vapor pressure,  $P_{vap}$ , then the flow is merely turbulent;
- Otherwise, the flow is turbulent and cavitating.

The decrease of pressure in the *vena contracta* is due to the contraction of streamlines that creates a negative pressure gradient. The pressure decreases in some areas and locally falls below the saturation vapor pressure. In this case cavitating bubbles appear inside the nozzle and contribute to the unsteadiness of the flow. Cavitation leads to a decrease of the effective area at the nozzle exit.



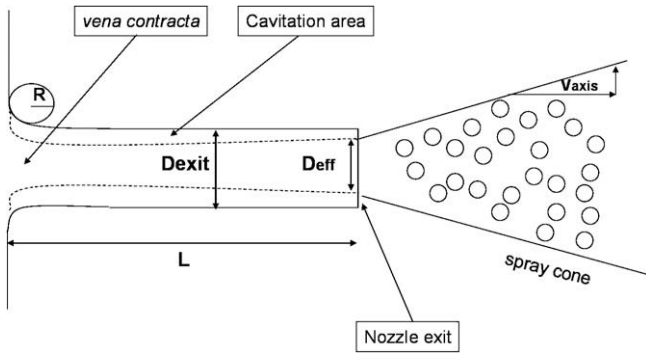


Fig. 2. Description of the injector geometry.

The conditions of transition to a cavitating flow are strongly linked to the geometrical parameters of the nozzle such as the curvature radius  $R$ , the nozzle length  $L$  and the geometrical diameter of the nozzle hole  $D_{exit}$  (see Fig. 2).

In the case of a cavitating flow the Bernoulli's equation between the region upstream from the nozzle and the *vena contracta* gives:

$$P_{vena} = P_{inj} - \frac{\rho_l}{2} U_{vena}^2 \quad (1)$$

where  $P_{inj}$  is the injection pressure,  $\rho_l$  the liquid density and  $U_{vena}$  the velocity at the smallest flow effective area. Following the expression of Nurick [24] for the contraction coefficient  $C_c$  and assuming a flat velocity profile, one obtains  $U_{vena} = \frac{U_{mean}}{C_c}$  and  $C_c = \left( \frac{\pi+2}{\pi} \right)^2 - 11.4R/D_{exit}$  where  $\pi \approx 3.14$  and  $U_{mean}$  is the mean velocity corresponding to the mean mass flow rate at the nozzle exit.

Then:

$$P_{vena} = P_{inj} - \frac{\rho_l}{2} \frac{U_{mean}^2}{C_c^2} \quad (2)$$

Because of the discharge loss involving a discharge coefficient  $C_d$ , the mean velocity at the nozzle exit is the Bernoulli velocity corresponding to the pressure drop  $P_{inj} - P_{ch}$ , multiplied by  $C_d$ :

$$U_{mean} = C_d \sqrt{\frac{2(P_{inj} - P_{ch})}{\rho_l}} \quad (3)$$

Bernoulli's velocity

where

$$C_d = \frac{1}{\sqrt{K_{inlet} + f \cdot \frac{L}{D_{exit}} + 1}} \quad (4)$$

in the case of a turbulent flow.  $K_{inlet}$  is the inlet loss coefficient tabulated according to Benedict [25].  $f$  is the Blasius coefficient for the laminar wall friction:  $f = \max(0.316R_e^{-0.25}, 64/R_e)$  and  $K_{inlet}$  is tabulated according to Benedict [25].

Then:

$$P_{vena} = P_{inj} - \frac{C_d^2}{C_c^2} (P_{inj} - P_{ch}) \quad (5)$$

If  $P_{vena} > P_{vap}$ , there is no transition to cavitating flow. In this case the effective area is the geometrical area of the nozzle hole ( $D_{eff} = D_{exit}$ ).

The exit velocity  $U_{exit}$  is then:

$$U_{exit} = U_{mean} = C_d \sqrt{\frac{2(P_{inj} - P_{ch})}{\rho_l}} \quad (6)$$

If  $P_{vena} < P_{vap}$ , the flow is fully cavitating and cavitation bubbles escape from the nozzle exit. In this case, the effective section area is

not the geometrical area of the nozzle hole ( $D_{eff} < D_{exit}$ ), and a new discharge coefficient is used:

$$C_d = C_c \sqrt{\frac{P_{inj} - P_{vap}}{P_{inj} - P_{ch}}} \quad (7)$$

The velocity in the *vena contracta* becomes:

$$U_{vena} = \sqrt{\frac{2(P_{inj} - P_{vap})}{\rho_l}} \quad (8)$$

Finally,  $U_{exit}$  and the effective exit section  $A_{eff}$  are obtained by application of the conservation equations of mass and momentum between the *vena contracta* and the nozzle exit:

$$U_{exit} = U_{vena} - \frac{(P_{ch} - P_{vap})}{\rho_l \cdot U_{mean}} \quad (9)$$

$$A_{eff} = A_{exit} \frac{U_{mean}}{U_{exit}} \quad (10)$$

with  $A_{exit} = \pi D_{exit}^2/4$ .

Once the exit velocity and the effective exit section have been determined, it is necessary to calculate the spray angle. This is done below.

### 3.3. Spray angle at nozzle exit

The determination of the spray angle is done by assuming that the spray angle at the nozzle exit is limited to the atomisation produced by the turbulence and the cavitation inside the nozzle. The atomisation model used in this work is inspired by the primary break-up model of Nishimura et al. [26]. The liquid jet atomisation produces droplets with a radial velocity that is due to the turbulent and cavitation energies which have to be determined. The combination of the axial and radial components of these velocities gives the spray angle.

#### 3.3.1. Turbulent kinetic energy due to high velocities

The turbulent kinetic energy  $k_{flow}$  of the flow inside the nozzle is given by the following empirical formula from Huh et al. [27]:

$$k_{flow} = \frac{U_{exit}^2}{8L/D_{exit}} \left( \frac{1}{C_d^2} - K_{inlet} - 1 \right) \quad (11)$$

This energy is generated by the high velocities inside the nozzle and the formula is obtained using simple overall mass, momentum, and energy balances. It is only valid for quasi-steady injection conditions.

#### 3.3.2. Cavitation energy

Cavitation energy is defined as the energy created by the collapse of bubbles or cavitation pockets inside the nozzle. This provides an increase of turbulent energy of the liquid.

When a cavitation pocket of volume  $V_p$  collapses, the energy  $E_{cav}$  given to the surrounding flow at static pressure  $P$  is then:

$$E_{cav} \approx \int_0^{V_p} P dV \quad (12)$$

Assuming that the liquid pressure in the nozzle is homogeneous and close to the pressure in the chamber, one gets:

$$E_{cav} \approx \int_0^{V_p} P dV = \int_0^{V_p} P_{ch} dV = V_p P_{ch} \quad (13)$$

For a liquid column or ligament of total mass  $m_t$ , mass density  $\rho_t \approx \rho_l$  and total volume  $V_t$  with  $n_p$  pockets, the kinetic energy  $k_{cav}$  provided by the cavitation is:

$$k_{cav} = \frac{1}{m_t} \sum_{k=0}^{n_p} V_{pk} P_{ch} = \frac{P_{ch}}{m_t} \sum_{k=0}^{n_p} V_{pk} = \frac{P_{ch}}{\rho_l} \frac{\sum_{k=0}^{n_p} V_{pk}}{V_t} = \frac{P_{ch}}{\rho_l} \frac{V_g}{V_t} \quad (14)$$

The gas volume fraction,  $V_g/V_t$ , can be determined from the effective section area previously calculated, assuming:

$$\frac{V_g}{V_t} \approx \frac{\text{Cavitation area}}{\text{Total area}} = \frac{A_{exit} - A_{eff}}{A_{exit}} \quad (15)$$

Using Eq. (15) in Eq. (14), one obtains:

$$k_{cav} = \frac{P_{ch}}{\rho_l} \left( \frac{A_{exit} - A_{eff}}{A_{exit}} \right) \quad (16)$$

The main advantage of this method is that it does not require the calculation of the pocket or bubble size, nor the bubble number, which are difficult to evaluate.

### 3.3.3. Determination of the spray angle at nozzle exit

The total fluctuating kinetic energy  $k_{tot}$  is the sum of the turbulent kinetic energy  $k_{flow}$  and the energy provided by the cavitation  $k_{cav}$ :

$$k_{tot} = k_{flow} + k_{cav} \quad (17)$$

This fluctuating kinetic energy provides a fluctuating velocity  $u'$ , assumed to be equal to the radial velocity  $U_{rad}$  of the liquid flow at the nozzle exit. The turbulence is considered isotropic so that:

$$U_{rad} = u' = \sqrt{\frac{2}{3} k_{tot}} \quad (18)$$

The spray angle  $\phi_{exit}$  at the nozzle exit (see Fig. 3) is then:

$$\tan(\phi_{exit}/2) = \frac{U_{rad}}{U_{exit}} \quad (19)$$

The injector model presented here permits to obtain the effective section (Eq. (10)), the velocity (Eqs. (6) and (9)), and the spray angle (Eq. (19)) at the nozzle exit.

## 4. Modelling for the DITurBC

From the spray characteristics at the nozzle exit, determined in the previous section, the mean profiles imposed downstream at the injection plane (DITurBC) are now computed. For this purpose, mass and momentum conservation equations are applied. A velocity fluctuation is then added to the mean profile in order to take into account the unsteadiness of the flow.

### 4.1. Spray angle at $10D_{exit}$ from nozzle exit

The angle  $\phi_{exit}$  calculated by the injector model differs from the spray angle  $\phi_{aero}$  far from the nozzle exit (see Fig. 3). Indeed,  $\phi_{exit}$  is mainly due to the injection condition and the shape of the nozzle whereas  $\phi_{aero}$  is controlled by aerodynamics (gas density and tur-

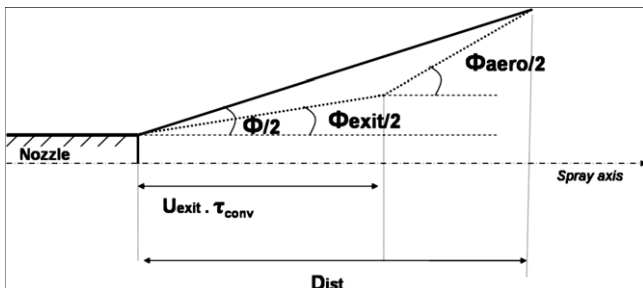


Fig. 3. Determination of the spray angle at distance  $Dist$  downstream from the nozzle exit.

bulence) and depends on conditions in the chamber [23]. To estimate if aerodynamic effects have sufficient time to affect the spray angle of the DITurBC, the characteristic aerodynamic time  $\tau_{aero}$  is compared to the convective time  $\tau_{conv} = Dist/U_{exit}$ :

Following [23], the aerodynamic spray angle, based on empirical considerations, is:

$$\tan(\phi_{aero}/2) = \frac{4\pi}{A} \sqrt{\frac{\rho_g f(T)}{\rho_l}} \quad (20)$$

where  $A$  and  $T$  are parameters set to  $A = 4.4$  and  $T = \left(\frac{Re}{We}\right)^2 \frac{\rho_g}{\rho_l}$  and  $f(T) = \left(\sqrt{3}/6(1 - \exp(-10T))\right)$  and  $We$  is the Weber number. According to [23], this equation predicts spray angles in very close agreement with measured values.

The aerodynamic time is linked to the density ratio and evaluated with the nozzle diameter and the exit velocity:

$$\tau_{aero} = C \sqrt{\frac{\rho_l D_{exit}/2}{\rho_g U_{exit}}} \quad (21)$$

where  $C$  is an additional constant empirically fixed by [28] at the value  $C = 1.73$ .

If  $\tau_{conv} < \tau_{aero}$ , aerodynamic effects are negligible and the spray angle  $\phi$  of the DITurBC is  $\phi = \phi_{exit}$ .

If  $\tau_{conv} \geq \tau_{aero}$ ,  $\phi$  is calculated with a simple geometrical law (see Fig. 3):

$$\tan(\phi/2) = \frac{\tau_{aero}}{\tau_{conv}} \tan(\phi_{exit}/2) + \left(1 - \frac{\tau_{aero}}{\tau_{conv}}\right) \tan(\phi_{aero}/2) \quad (22)$$

### 4.2. Radial profiles

In this section, the radial profiles of liquid volume fraction  $\alpha_l$ , axial velocity  $U_{axial}$ , radial velocity  $U_{rad}$  and droplet size  $d$  are determined. Experimental measurements from [21] using X-ray absorption in the near-nozzle region have shown that radial profiles of liquid volume fraction are well described by a Gaussian profile. Furthermore, according to Chaves et al. [29], radial profiles of mean axial velocity are near Gaussian. Lastly, according to Ueki et al. [20], who measured droplet sizes and velocities near the injector exit, the radial profiles of axial velocity and droplet diameter are correlated and Gaussian. Based on these experiments, the radial profile of liquid volume fraction, axial droplet velocity and droplet sizes are assumed to be Gaussian:

$$\alpha_l = \alpha_{l,max} \cdot e^{-\frac{r^2}{2\sigma_\alpha^2}} \quad (23)$$

$$U_{axial} = U_{l,max} \cdot e^{-\frac{r^2}{2\sigma_U^2}} \quad (24)$$

$$d = d_{max} \cdot e^{-\frac{r^2}{2\sigma_d^2}} \quad (25)$$

where  $\alpha_{l,max}$ ,  $U_{l,max}$  and  $d_{max}$  are the values on the spray axis on the DITurBC plane,  $r$  is the radial coordinate and  $\sigma_\alpha^2$ ,  $\sigma_U^2$ ,  $\sigma_d^2$  are the Gaussian width parameters.

Because of the correlation between the profile of axial velocity and droplet size, the same Gaussian width are assumed for these two profiles:  $\sigma_d^2 = \sigma_U^2$ . Furthermore, due to the high density of liquid near the nozzle, measurements of droplet sizes are not reliable and there exists no experimental correlation for  $d_{max}$ . According to Smallwood et al. [18], the droplet size for Diesel injection is between  $5 \mu\text{m}$  and  $15 \mu\text{m}$ . Taking into account that the spray is initialised close to the nozzle exit and that larger diameter may still be present, an arbitrary maximum droplet size of  $20 \mu\text{m}$  is supposed. A sensitivity study on the influence of the maximum diameter has been conducted by Martinez et al. [30] using LES. The conclusion is that the diameter has a weak influence on spray penetration in the considered test cases and the value  $20 \mu\text{m}$  gives

the best results. This emphasised that this free parameter is not critical for the simulation and 20  $\mu\text{m}$  is a good approximation.

The unknown parameters  $U_{l,max}$ ,  $\sigma_U^2$ ,  $\alpha_{l,max}$ ,  $\sigma_z^2$  are determined later in Section 4.3.

The radial profile of radial velocity is taken from Eq. (19), assuming a linear increase with the radial coordinate. Indeed, the larger droplets remain on the spray axis due to their higher inertia while smaller droplets are more easily entrained by the gas towards the periphery of the spray and therefore gain radial velocity. The formulation is then:

$$U_{rad} = U_{axial} \tan(\phi/2)r/W = U_{max} \cdot e^{-\frac{r^2}{2\sigma_U^2}} \tan(\phi/2)r/W \quad (26)$$

where  $W$  is the half-width of the spray.

#### 4.3. Determination of gaussian parameters

The radial profile of velocity, liquid volume fraction and droplet diameters presented above require to determine the four unknown parameters  $\alpha_{l,max}$ ,  $U_{l,max}$ ,  $\sigma_{z_x}$  and  $\sigma_U$ .

##### 4.3.1. Gaussian width of the liquid volume fraction profile on the DITurBC plane

The Gaussian width  $\sigma_z$  represents the spray angle and can be expressed as Full Width at Half Maximum (FWHM) which corresponds to the width of half the spray angle  $2r_{HM}$ . This formulation is traditionally used in experiments [31]. This gives from Eq. (23):

$$\frac{\alpha_{l,max}}{2} = \alpha_{l,max} \cdot e^{-\frac{r_{HM}^2}{2\sigma_z^2}} \quad (27)$$

with  $r_{HM} = \tan(\phi/4) \cdot Dist + D_{exit}/2$ , where  $Dist = 10D_{exit}$  is the distance to the nozzle exit. The Gaussian width is then:

$$\sigma_z = \frac{r_{HM}}{\sqrt{2 \ln 2}} = \frac{\tan(\phi/4) \cdot Dist + D_{exit}/2}{\sqrt{2 \ln 2}} \quad (28)$$

##### 4.3.2. Velocity on the DITurBC plane

The maximum axial velocity on the DITurBC plane is supposed to be equal to the axial velocity at the nozzle exit:

$$U_{l,max} = U_{Dist} \approx U_{exit} \quad (29)$$

The assumption of Eq. (29) cannot be strictly correct. Nevertheless, it is assumed that the energy exchange between gas and liquid does not affect significantly the maximum axial velocity located on the spray axis. Furthermore, this assumption applies only on the spray axis where the density ratio between the two phases is maximum and the decrease of velocity is then minimum.

Concerning the gas axial velocity, two choices may be considered:

- No gas entrainment: the axial gas velocity is zero on the DITurBC plane. This hypothesis may prove interesting because it avoids a gas inflow boundary condition. As demonstrated below, this case is not physically acceptable but its analysis allows a better understanding of the influence of some physical phenomena on the radial profiles.
- Gas entrainment: the idea is to calculate the axial gas velocity by considering the conservation of liquid axial momentum.

These two possibilities are addressed below.

By conservation of the mass flow rate  $Q$  between the nozzle exit and the DITurBC plane and given the spray half-width  $W = \tan(\phi/2) \cdot Dist + D_{exit}/2$ , one gets:

$$Q = U_{exit} \cdot A_{eff} \cdot \rho_l = \int_0^{2\pi} \int_0^W r\alpha(r)U(r)\rho_l dr d\beta \quad (30)$$

Using the Gaussian profiles, one gets:

$$\begin{aligned} Q &= 2\pi\rho_l \int_0^W r\alpha(r)U(r) dr \\ &= 2\pi\rho_l \int_0^W r\alpha_{l,max}U_{exit} \exp^{-\frac{r^2}{2\sigma_z^2}} \exp^{-\frac{r^2}{2\sigma_U^2}} dr \end{aligned} \quad (31)$$

Simplifying with the parameters  $\sigma_1^2 = \frac{2\sigma_z^2\sigma_U^2}{\sigma_z^2 + \sigma_U^2}$  and integrating by parts gives:

$$Q = \rho_l\alpha_{l,max}U_{exit}\pi\sigma_1^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_1^2}}\right) \quad (32)$$

Thus:

$$\alpha_{l,max} = \frac{A_{eff}}{\pi\sigma_1^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_1^2}}\right)} \quad (33)$$

If the gas velocity is zero, the liquid axial momentum is conserved:

$$U_{exit}^2 \cdot A_{eff} \cdot \rho_l = \int_0^{2\pi} \int_0^W r\alpha(r)U^2(r)\rho_l dr d\beta \quad (34)$$

Integrating by parts gives:

$$U_{exit}^2 \cdot A_{eff} = \pi U_{exit}^2 \alpha_{l,max} \sigma_2^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_2^2}}\right) \quad (35)$$

with  $\sigma_2^2 = \frac{2\sigma_z^2\sigma_U^2}{2\sigma_z^2 + \sigma_U^2}$ .

Using Eq. (33) gives:

$$\sigma_2^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_2^2}}\right) = \sigma_1^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_1^2}}\right) \quad (36)$$

This equality is verified only if  $1/\sigma_U^2 = 0$ , that means that the hypothesis of a Gaussian profile on the velocity is wrong. This is in contradiction with what is found experimentally [29]. In conclusion, the Gaussian shape of the liquid axial velocity, observed experimentally, is due to the exchange of axial momentum via drag force between the liquid and the gas.

Furthermore, the mass and axial momentum conservation do not constrain the parameter  $\sigma_z$ . The Gaussian shape of the liquid volume fraction is due solely to the spray opening by atomisation. For practical purposes, the hypothesis of a zero axial gas velocity is not compatible with the hypothesis of a Gaussian profile of axial liquid velocity.

For these reasons, the case of no entrainment is discarded and the gas velocity is given a Gaussian shape supposed similar to that of the liquid radial profile:

$$U_g = U_{g,max} \cdot e^{-\frac{r^2}{2\sigma_g^2}} \quad (37)$$

As discussed previously, the gas velocity is the result of drag and so depends on the liquid velocity. Therefore, the similarity with the liquid seems justified. This implies that the gas phase and the liquid phase are rapidly in equilibrium.

Taking into account the decrease of axial liquid velocity by exchange with the gas phase and using the mass conservation equation, one obtains:

$$\alpha_{l,max} = \frac{U_{exit}A_{eff}}{U_{l,max}\pi\sigma_1^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_1^2}}\right)} \quad (38)$$

Considering a steady spray and neglecting pressure gradient, the conservation of axial momentum of the system 'gas + liquid' between the nozzle exit and the DITurBC plane, normal to the spray axis, yields:

$$U_{exit}^2 \cdot A_{eff} \cdot \rho_l = \int_0^{2\pi} \int_0^W r \alpha_l(r) U_l^2(r) \rho_l dr d\beta + \int_0^{2\pi} \int_0^W r \alpha_g(r) U_g^2(r) \rho_g dr d\beta \quad (39)$$

Using the equality  $\alpha_g(r) = 1 - \alpha_l(r)$ , one obtains after integration:

$$U_{exit}^2 \cdot A_{eff} \cdot \rho_l = \pi U_{l,max}^2 \alpha_{l,max} \rho_l \sigma_2^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_2^2}}\right) + \pi U_{g,max}^2 \rho_g \sigma_U^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_U^2}}\right) - \pi U_{g,max}^2 \alpha_{l,max} \rho_g \sigma_2^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_2^2}}\right) \quad (40)$$

with  $\sigma_2^2 = \frac{2\sigma_2^2 \sigma_U^2}{2\sigma_2^2 + \sigma_U^2}$ .

Using Eq. (38) one gets:

$$U_{exit}^2 \cdot A_{eff} \cdot \rho_l = U_{l,max} \frac{U_{exit} A_{eff}}{\sigma_1^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_1^2}}\right)} \rho_l \sigma_2^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_2^2}}\right) + \pi U_{g,max}^2 \rho_g \sigma_U^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_U^2}}\right) - U_{g,max}^2 \frac{U_{exit} A_{eff}}{U_{l,max} \sigma_1^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_1^2}}\right)} \rho_g \sigma_2^2 \left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{\sigma_2^2}}\right) \quad (41)$$

$\sigma_x^2$  can be expressed in terms of  $\sigma_U^2$  by using the parameter  $K$  defined by  $\sigma_x^2 = K \sigma_U^2$ . Thus,  $\sigma_2^2 = \frac{2}{2K+1} \sigma_x^2$  and  $\sigma_1^2 = \frac{2}{K+1} \sigma_x^2$ .

$$U_{exit} = U_{l,max} \frac{(K+1)}{(2K+1)} \frac{\left(1 - \exp^{-\frac{(2K+1)W^2}{2\sigma_x^2}}\right)}{\left(1 - \exp^{-\frac{(K+1)W^2}{2\sigma_x^2}}\right)} + \frac{\pi \cdot U_{g,max}^2 \cdot \sigma_x^2 \cdot \rho_g}{K U_{exit} \cdot A_{eff} \cdot \rho_l} \left(1 - \exp^{-\frac{KW^2}{\sigma_x^2}}\right) - \frac{(K+1)}{(2K+1)} \frac{U_{g,max}^2 \rho_g}{U_{l,max} \rho_l} \frac{\left(1 - \exp^{-\frac{(2K+1)W^2}{2\sigma_x^2}}\right)}{\left(1 - \exp^{-\frac{(K+1)W^2}{2\sigma_x^2}}\right)} \quad (42)$$

The remaining unknown parameters are now  $K$  and  $U_{g,max}$ .

In order to determine  $U_{g,max}$ , it is assumed that the liquid–gas equilibrium is rapidly achieved. In this case  $U_{g,max} = U_{l,max}$ . Let us consider the characteristic time  $\Delta t$ , which is the time for the gas to accelerate from zero to the liquid velocity. This time is determined using the axial momentum equation of the gas phase, considering only the drag force:

$$\alpha_g \rho_g \frac{U_{g,max}}{\Delta t} \approx \alpha_l \rho_l \frac{U_{l,max}}{\tau_p} \quad (43)$$

The time for the gas to accelerate from zero to the liquid velocity is then:

$$\Delta t = \frac{\alpha_g \rho_g}{\alpha_l \rho_l} \tau_p \quad (44)$$

with  $\tau_p$  the relaxation time defined for a droplet of diameter  $d$  defined as:

$$\tau_p \approx \frac{d^2 \rho_l}{18 \mu_g} \quad (45)$$

Under the assumption of a maximum droplet diameter of  $d = 20 \mu\text{m}$  (see Section 4.2), one obtains:

$$\Delta t = 1.6 \times 10^{-4} \text{ s}$$

with  $\mu_g = 2 \times 10^{-5} \text{ Pa/s}$ ,  $\rho_g = 36 \text{ kg/m}^3$ ,  $\alpha_g = 0.8$  and  $\alpha_l = 0.2$ . These numerical values correspond to the experiment of Chaves et al. [29] described in Section 5.3. This time is shorter than the needle opening time ( $\approx 0.2 \text{ ms}$ ). Consequently, it is assumed that the gas velocity reaches the liquid velocity before the needle has completely opened.

In addition, during this period, the flow is fully unsteady with a spray angle varying in time and the model presented here is not predictive anyway. Therefore, the hypothesis  $U_{g,max} = U_{l,max}$  is justified. Furthermore, a turbulent field will be imposed on the boundary condition so that the accuracy on  $U_{g,max}$  is not crucial. The most important is to ensure the conservation of the mass and momentum fluxes.

Finally, in order to find  $K$  it is assumed that:

$$\frac{\left(1 - \exp^{-\frac{(K+2)W^2}{2K\sigma_x^2}}\right)}{\left(1 - \exp^{-\frac{(K+1)W^2}{2K\sigma_x^2}}\right)} \approx 1 \quad (46)$$

In the same way it is presumed that:

$$\left(1 - \exp^{-\frac{W^2}{K\sigma_x^2}}\right) \approx 1 \quad (47)$$

This is the same as integrating mass and axial momentum fluxes between 0 and  $\infty$  instead of 0 and  $W$ . Eq. (42) then becomes a second order equation in  $K$ :

$$a_2 K^2 + a_1 K + a_0 = 0 \quad (48)$$

with:

$$a_2 = 2U_{exit} - U_{l,max} + \frac{U_{l,max} \rho_g}{\rho_l} \quad (49)$$

$$a_1 = U_{exit} - U_{l,max} - \frac{2\pi \cdot U_{g,max}^2 \cdot \rho_g \cdot \sigma_x^2}{U_{exit} \cdot A_{eff} \cdot \rho_l} + \frac{U_{l,max} \rho_g}{\rho_l} \quad (50)$$

$$a_0 = -\frac{\pi \cdot U_{g,max}^2 \cdot \sigma_x^2 \cdot \rho_g}{U_{exit} \cdot A_{eff} \cdot \rho_l} \quad (51)$$

The two solutions of Eq. (48) are:  $K_1 = \frac{-a_1 + \sqrt{a_1^2 - 4a_2 a_0}}{2a_2}$  and  $K_2 = \frac{-a_1 - \sqrt{a_1^2 - 4a_2 a_0}}{2a_2}$ . Because  $a_2 > 0$  and  $a_0 < 0$ , the only positive solution

is  $K_1$ . The negative solution  $K_2$  is discarded because it leads to a non-Gaussian shape on the velocity profile. Finally, knowing  $K_1$  and  $\sigma_x^2$  and using the expression  $\sigma_x^2 = K \sigma_U^2$ , one obtains  $\sigma_U^2$  and then  $\alpha_{l,max}$  with Eq. (38).

To resume, the four Gaussian parameters are obtained using Eq. (27) for  $\sigma_x^2$ , Eq. (29) for  $U_{l,max}$ , Eq. (48) for  $\sigma_U^2$  and Eq. (38) for  $\alpha_{l,max}$ .

#### 4.4. Turbulent boundary conditions

The profiles obtained in the previous sections for the boundary conditions are mean profiles. A drawback of the proposed method is that the history of the gas and liquid flows between the injector exit and the DITurBC plane is lost. To compensate, unsteady boundary conditions are used that reproduce the unsteadiness of the flow due to the phenomena occurring inside the nozzle and the turbulence generated between the nozzle exit and the DITurBC plane.

In order to create a turbulence field with a given statistical profile, a non-dimensional homogeneous fluctuating velocity field is first generated. This field is then rescaled and added to the mean

velocity profile on the DITurBC for both liquid and gas phases. The method is based on the work of Kraichnan [32] and a similar method is used by Smirnov et al. [33].

The use of these turbulent boundary conditions as well as their influence on the spray formation will be described in a future paper.

**5. Validation**

The model for the DITurBC is validated in two steps. First, the nozzle exit velocity and spray angle given by the injector model are confronted to measurements in Section 3. Then, comparing the modelled radial profiles of velocities with experimental results evaluates the construction of the Gaussian profiles of Section 4.

**5.1. Injection velocity**

The validation of the turbulence–cavitation model is achieved by comparison with the experimental measurements of Leick et al. [34] obtained with an injection pressure of 22 MPa. Two different pressures in the chamber are used: 0.1 MPa and 2 MPa, corresponding to Bernoulli velocity of 230 m/s and 220 m/s respectively (see Table 1). The velocity measurements are made at 1.9 mm ≈ 12D from the nozzle exit at an injection pressure of 22 MPa with a nozzle diameter of 154 μm.

As shown in Table 1, the predicted exit velocities are very close to the experimental measurements. In the experiment, the velocity is not constant so that a range of velocity is used for the comparison. The model gives a mean velocity  $U_{dist}$  divided by Bernoulli velocity  $U_B$  of  $U_{dist}/U_B = 0.9$  which is in the range of measured velocities ( $0.87 < U_{dist}/U_B < 1$ ) for the chamber pressure of 0.1 MPa. The model gives also good results with the chamber pressure of 2 MPa which is more relevant in engine applications.

**5.2. Spray angles at nozzle exit**

The sub-models for the spray angle are validated by comparison with the experimental data of Blessing et al. [14], who measured spray angles for three nozzles denoted 1, 2 and 3 in Table 2. The nozzles have different conical shape factors leading to different spray angles due to cavitation. The spray angles are measured at the nozzle exit. The conical shape factor is taken into account in the model by changing the curvature radius which is recomputed from [14].

**Table 1**  
Comparison of spray exit velocity with experimental data of Leick et al. [34].

Case	I	II
Injection pressure $P_{inj}$ (MPa)	22	22
Chamber pressure $P_{ch}$ (MPa)	0.1	2
Bernoulli velocity $U_B$ (m/s)	230	220
Experiment: spray exit velocity divided by $U_B$	0.87–1	0.87–0.96
Model: spray exit velocity divided by $U_B$	0.91	0.9

**Table 2**  
Comparison of the spray angle predicted by the model with the experiment of Blessing et al. [14] for three different nozzles.

Number of the nozzle	Spray angle (°)	
	DI TurBC	Experiment
1	5.5	6
2	10	9.6
3	13	13.5

For the three injector nozzles, the model is able to take into account the impact of the nozzle geometry on cavitation and then on the spray angle. The relative difference is less than 10% which is very good for spray angles. The spray angle is an important parameter in the DITurBC model as it is used to set the Gaussian width and the radial liquid velocity.

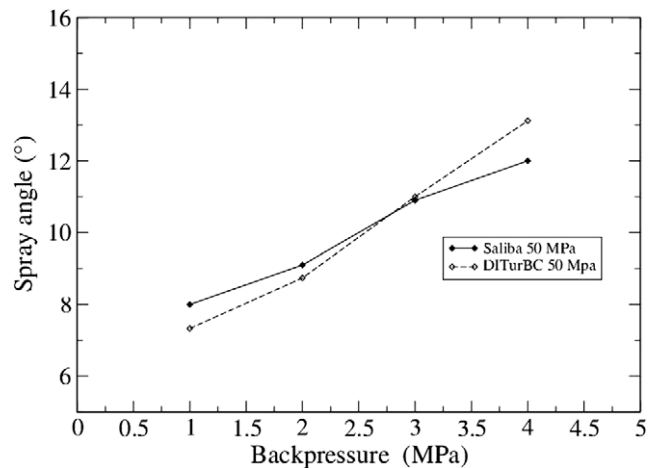
Other spray angle measurements may be found in Saliba et al. [35], at 2 mm from the nozzle exit and for different backpressures (from 1 to 4 MPa). Results are depicted on Fig. 4. Model results are less accurate for these cases but the increase of the angle with the chamber pressure (backpressure), an effect described by the aerodynamical spray angle (see Section 4.1), is reproduced. Considering this effect is important in engine applications because the backpressure can have very different values depending on the instant of injection.

The maximum difference is about 1° which is of the same order of magnitude than the variation of the spray angle during injection. As already described, the precision is sufficient.

**5.3. Axial velocity profile at 10D<sub>exit</sub> from nozzle exit**

Chaves et al. [29] have measured the radial profile of the spray axial velocity at  $x/D_{exit} = 10$  from the nozzle exit (see Table 3). This corresponds to a Diesel-like liquid injection without cavitation at a moderate pressure ( $\Delta P = 10$  MPa) into a quiescent dense air (3 MPa). The injector nozzle diameter is  $D = 200$  μm. The measurements are made after the injection reaches a quasi-steady state. The Bernoulli velocity is 154.7 m/s for this case.

A first interesting observation is that the absence of cavitation is in agreement with the prediction of the injector model (Eq. (5)). The second interesting observation (see Table 3) is that the discharge coefficient measured by Chaves et al. [29] ( $C_d = 0.88$ ) is also well predicted by the model ( $C_d = 0.88$  using Eq. (4)).



**Fig. 4.** Comparison of the spray angle predicted by the model with the experiments of Saliba et al. [35] at  $x = 2$  mm for different injection pressures.

**Table 3**  
Comparison of discharge coefficient and spray angle provided by the model with experimental data of Chaves et al. [29].

$P_{inj}$	130
$P_{ch}$	30
Discharge coefficient via experiment	0.88
Discharge coefficient via model	0.88
Spray angle via experiment (°)	8.5
Spray angle via model (°)	7.5

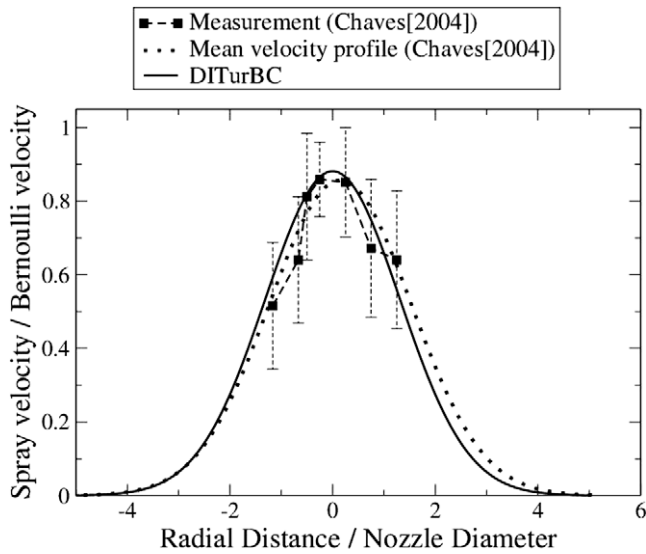


Fig. 5. Comparison of radial profile of spray axial velocity with experimental data of Chaves et al. [29] at  $x/D_{exit} = 10$ .

From the shadowgraphy provided by Chaves et al. [29], the spray angle is measured ( $8.5^\circ$ ) and compared to the value obtained with the model ( $7.5^\circ$ ). Again, the agreement is very good (see Table 3).

The radial profile of mean axial spray velocity are reported in Fig. 5. The Gaussian width is very well predicted which confirms the good accuracy of the model for the mean profiles. Furthermore, this confirms that Eq. (47) is a good hypothesis as, for this case, the parameter provided by the model are:  $\sigma^2 = 7.7 \times 10^{-8}$ ,  $K = 0.48$ ,  $W = 7 \times 10^{-4}$  and then  $\left(1 - \exp\left(-\frac{W^2}{K\sigma^2}\right)\right) \approx 0.999$ . The parameter  $K = 0.48$  means that the Gaussian on the liquid volume fraction is about two times larger than the Gaussian on the axial liquid velocity. Therefore, high velocities droplets are concentrated near the spray axis and there is an important difference of velocity between the droplets near the spray axis and the droplets localised at the periphery. In addition, the model gives  $\alpha_{l,max} = 0.2$ , revealing that there is no liquid core but a gas/liquid mixture at 10 nozzle diameters from the nozzle exit. Nevertheless, the liquid volume fraction is not small enough to confirm that the spray is fully dispersed with spherical droplets.

#### 5.4. Sensitivity study on input parameters

A sensitivity study on the input parameters is proposed. Table 4 sums up the input parameters of the DITurBC model. The experi-

Table 4  
Summary of the input parameters for the DITurBC model.

Type of input	Name	Description
Geometry	$R$	Curvature radius
	$D_{exit}$	Nozzle exit diameter
	$L$	Nozzle length
	$Dist$	Distance to nozzle exit (location of the DITurBC plane)
Injection conditions	$P_{inj}$	Injection pressure
	$P_{ch}$	Chamber pressure
Physical properties	$\rho_g$	Gas density
	$\rho_l$	Liquid density
	$\mu_g$	Gas viscosity
	$\mu_l$	Liquid viscosity
	$P_{vap}$	Saturation vapor pressure

ence of Chaves et al. [29] presented in Section 5.3 is used as the test case.

The radial profiles of mean axial liquid velocity and liquid volume fraction, obtained with a variation of the parameters  $P_{inj}$ ,  $R$  and  $P_{ch}$ , are presented in Figs. 6 and 7.

All other parameters remaining constant, an increase of the injection pressure leads to an increase of the injection velocity (Eq. (6)) but the discharge coefficient, depending essentially on the nozzle geometry (Eq. (4)), remains relatively unchanged. Therefore, the ratio between axial velocity and Bernoulli's velocity is nearly constant. Even with an injection pressure of 83 MPa, the model predicts no cavitation. The spray angle at the nozzle exit calculated by Eq. (19) can then be simplified because the energy  $k_{cav}$  provided by the cavitation is null. Using Eqs. (11), (17) and (4), one obtains:

$$\tan(\phi_{exit}/2) = \frac{U_{rad}}{U_{exit}} = \sqrt{\frac{f}{12}} \quad (52)$$

One can see that the spray angle at the nozzle exit depends only on the Blasius' coefficient  $f$ . For  $P_{inj} = 13$  MPa, the spray angle at the nozzle exit is  $3.36^\circ$ . This value is almost equal to the value at  $P_{inj} = 83$  MPa, which is  $2.95^\circ$ . The spray angle on the DITurBC plane calculated by Eq. (22) is  $7.5^\circ$  at  $P_{inj} = 13$  MPa and  $7.4^\circ$  at  $P_{inj} = 83$  MPa.

This shows that, in a non-cavitating regime, the spray angle does not depend on the injection pressure but mainly on the condition in the chamber via aerodynamic effects. This analysis allows us to understand why the axial liquid velocity and the liquid volume fraction profiles are quasi-independent of the injection pressure. But this analysis is only valid if the flow inside the injector is non-cavitating.

The main parameter that influences the transition to a cavitating regime is the curvature radius  $R$ . A sharp edge at the inlet of the nozzle contributes to a decrease of the pressure in the vena contracta which leads to cavitation. If one changes the curvature radius from  $30 \mu\text{m}$  to  $10 \mu\text{m}$ , with all other parameters remaining constant, the model predicts a cavitating regime. The spray angle on the DITurBC changes from  $7.5^\circ$  to  $9.0^\circ$ . Furthermore, the cavitation regime leads to a change in the discharge coefficient which explains the discrepancies in the radial profiles in Figs. 6 and 7.

An important parameter that influences the profiles is the chamber pressure  $P_{ch}$ . When increasing the chamber pressure, the spray is widening. This effect can be seen on the profile of li-

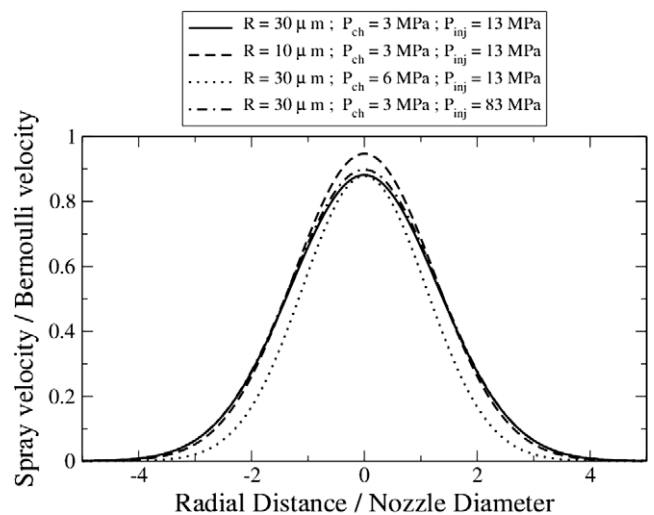


Fig. 6. Influence of the input parameters  $R$ ,  $P_{ch}$  and  $P_{inj}$  on the radial profile of spray mean axial velocity.

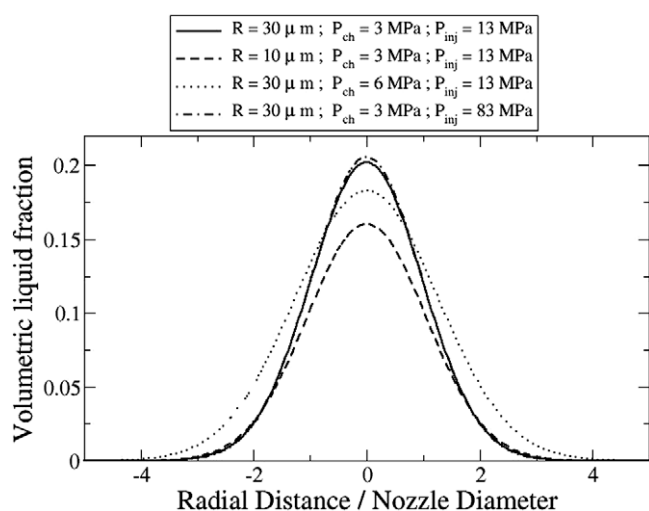


Fig. 7. Influence of the input parameters  $R$ ,  $P_{ch}$  and  $P_{inj}$  on the radial profile of mean liquid volume fraction.

quid volume fraction on Fig. 7. The profile of axial liquid velocity in Fig. 6 is narrower because the exchange of energy between the liquid and the gas phase is higher and then the decrease in liquid velocity is more important.

## 6. Concluding remarks

In this paper, a model for liquid injection boundary conditions, called DITurBC, has been presented. The model uses characteristic features of the injector to build an algebraic description of all spray characteristics and profiles near the nozzle exit.

These profiles can be used as boundary conditions for the Eulerian–Eulerian simulation of Diesel Sprays especially in Large Eddy Simulation. By initialising the spray slightly downstream from the nozzle exit, the DITurBC model allows 3D simulation without solving the complex spray physics at the nozzle exit. Furthermore, this methodology avoids to mesh the nozzle exit, a zone requiring very small mesh size, resulting in a decrease of the computational cost.

The boundary conditions are based on an injector model that determines whether the flow inside the nozzle is cavitating. Knowing the flow regime and the intensity of turbulence and cavitation, the velocity and the spray angle at the nozzle exit are deduced. Then, by the application of conservation laws, velocity, liquid volume fraction, and droplet size profiles are calculated at a given distance downstream from the nozzle exit, which represent the boundary condition DITurBC. These mean profiles are assumed to be Gaussian. The Gaussian widths of velocity and liquid volume fraction are found to be different and the conservation laws of mass and axial momentum permit to exhibit a relation between them.

The model has been tested against few experiments and is a good starting point if one wants to avoid more expensive calculation of the atomisation process. First, the liquid exit velocity has been assessed with a very good agreement. Secondly, the influence on the spray angle of the nozzle geometry and of the chamber pressure has been validated and has shown good tendencies. Finally, the physics and hypothesis of the model have been confirmed on the experiment of Chaves et al. [29]. The concordance on the radial profile of axial liquid velocity is within the range of measure uncertainty.

The DITurBC model has been proved to be well adapted for Diesel-like conditions in real engine applications. Nevertheless, the model can only be used in quasi-steady injection, *i.e.* when the nee-

dle is fully opened. In addition, the influence of the DITurBC model on a LES of spray has to be checked in a further analysis.

The implementation of DITurBC in the AVBP CFD code [36] has been done. LES of Diesel Sprays using these DITurBC is under preparation and will be published in a future paper.

## References

- [1] Ryan TW, Callahan TJ. Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) of diesel fuel. SAE 961160, 1996.
- [2] Lu XC, Chen W, Huang Z. A fundamental study on the control of the HCCI combustion and emissions by fuel design concept combined with controllable EGR: Part 1. The basic characteristic of HCCI combustion. Fuel 2005;84:1074–83.
- [3] Ozdor N, Dulger M, Sher E. Cyclic variability in spark ignition engines. A literature survey. SAE 950683, 1994.
- [4] Launder BE, Spalding DB. Mathematical models of turbulence. Academic Press; 1972.
- [5] Drake MC, Haworth D. Advanced gasoline engine development using optical diagnostic and numerical modeling. In: Proceedings of the 31st symposium (int) on combustion. The Combustion Institute; 2007.
- [6] Sagaut P. Large Eddy Simulation for incompressible flows. Scientific computation series. Springer-Verlag; 2000.
- [7] Selle L, Benoit L, Poinso T, Nicoud F, Krebs W. Joint use of Compressible Large-Eddy Simulation and Helmholtz solvers for the analysis of rotating modes in an industrial swirled burner. Combust Flame 2006;145:194–205.
- [8] Schmitt P, Poinso TJ, Schuermans B, Geigle K. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. J Fluid Mech 2007;570:17–46.
- [9] Richard S, Colin O, Vermorel O, Benkenida A, Angelberger C, Veynante D. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. In: Proc of the Combustion Institute, 2007. p. 31.
- [10] Vermorel O, Richard S, Colin O, Angelberger C, Benkenida A. Multi-cycle LES simulations of flow and combustion in a PFI SI 4-valve production engine. SAE PAPER 2007-01-0151, 2007.
- [11] Abraham J. What is adequate resolution in the numerical computations of transient jets? Trans SAE 1997;106:141–55.
- [12] Iyer V, Abraham J. Penetration and dispersion of transient gas jets and sprays. Combust Sci Technol 1997;130:315–35.
- [13] Subramaniam S, O'Rourke P. Numerical convergence of the KIVA-3 code for sprays and its implications for modeling. Los Alamos Lab. Rep. UR-98-5465, Los Alamos, NM, 1998.
- [14] Blessing M, Knig G, Krnger C, Michels U, Schwarz V. Analysis of flow and cavitation phenomena in diesel injection Nozzles and its effects on spray and mixture formation. SAE 2003-01-1358, 2003.
- [15] Hiroyasu H. Spray break-up mechanism from the hole-type nozzle and its applications. Atomiz Sprays 2000;10:511–27.
- [16] Sou A, Hosokawa S, Tomiyama A. Effects of cavitation in a nozzle on a liquid jet atomization. Int J Heat Mass Transfer 2007;50:3575–82.
- [17] Habchi C, Dumont N, Simonin O. Multidimensional simulation of cavitating flows in diesel injectors by a homogeneous mixture modeling approach. Atomiz Sprays 2008;18:129–62.
- [18] Smallwood G, Gulder O. Views on the structure of transient diesel sprays. Atomiz Sprays 2000;10:355–86.
- [19] Soteriou C, Andrews R, Smith M. Direct injection diesel sprays and the effect of cavitation and hydraulic flip on atomization. SAE 950080, 1995.
- [20] Ueki H, Ishida D, Naganuma M. Simultaneous measurements of velocity and size of diesel fuel near nozzle orifice by laser 2-focus velocimeter with micro-scale probe volume. In: THIESEL 2004 conference on thermo- and fluid dynamic processes in diesel engines, 2004.
- [21] Yue Y, Powell CF, Poola R, Wang J, Schaller JK. Quantitative measurements of diesel fuel spray characteristics in the near-nozzle region using X-ray absorption. Atomiz Sprays 2001;11:471–90.
- [22] Tanner FX, Feigl KA, Ciatti SA, et al. Structure of high-velocity dense sprays in the near-nozzle region. Atomiz Sprays 2006;16:579–97.
- [23] Sarre C, Kong SC, Reitz RD. Modeling the effects of injector nozzle geometry on diesel sprays. SAE PAPER 1999-01-0912, 1999.
- [24] Nurick WH. Orifice cavitation and its effect on spray mixing. J Fluids Eng 1976;98:681–7.
- [25] Benedict RP. Fundamentals of pipe flows. New York: Wiley; 1980.
- [26] Nishimura A, Assanis DN. A model for primary diesel fuel atomization based on cavitation bubble collapse energy in ICLASS2000 (Pasadena, CA), 2000.
- [27] Huh KY, Gosman AD. A phenomenological model for diesel spray. Atomization international conference on multiphase flows'91, 1991.
- [28] O'Rourke PJ, Amsden AA. The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. SAE 872089, 1987.
- [29] Chaves H, Kirmse C, Obermeier F. Velocity measurement of dense diesel fuel sprays in dense air. Atomiz Sprays 2004;14:589–609.
- [30] Martinez L, Vié A, Jay S, Benkenida A, Cuenot B. Large Eddy Simulation of fuel sprays using the Eulerian mesoscopic approach. Validations in realistic engine conditions in ICLASS-2009 (Vail, Colorado, USA), 2009.

- [31] Powell CF, Ciatti SA, Cheong S-K, Lu J, Wang J. X-ray absorption measurements of diesel sprays and the effects of nozzle geometry. SAE PAPER 2004-01-2011, 2004.
- [32] Kraichnan RH. Diffusion by a random velocity field. *Phys Fluids* 1970;13:22–31.
- [33] Smirnov A, Shi S, Celik I. Random flow generation technique for large eddy simulations and particle-dynamics modeling. *Trans ASME J Fluids Eng* 2001;123:359–71.
- [34] Leick Ph, Bittlinger G, Tropea C. Velocity Measurements in the near nozzle region of common-rail diesel sprays at elevated back-pressures. In: 19th annual meeting of the institute for liquid atomization and spray systems (Europe), 2004.
- [35] Saliba R, Baz I, Champoussin JC, Lance M, Marié JL. Cavitation effect on the near nozzle spray development in high pressure diesel injection. In: 19th annual meeting of the institute for liquid atomization and spray systems (Europe), 2004.
- [36] Moureau V, Lartigue G, Sommerer Y, Angelberger C, Colin O, Poinot T. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J Comput Phys* 2004;202:710–36.



### 6.3 Complément

Afin de prendre en compte le décalage de la condition limite, un cône est créé dans le maillage. La condition limite DiTurBC est appliquée sur le cône comme le montre la figure 6.1 : La largeur du cône

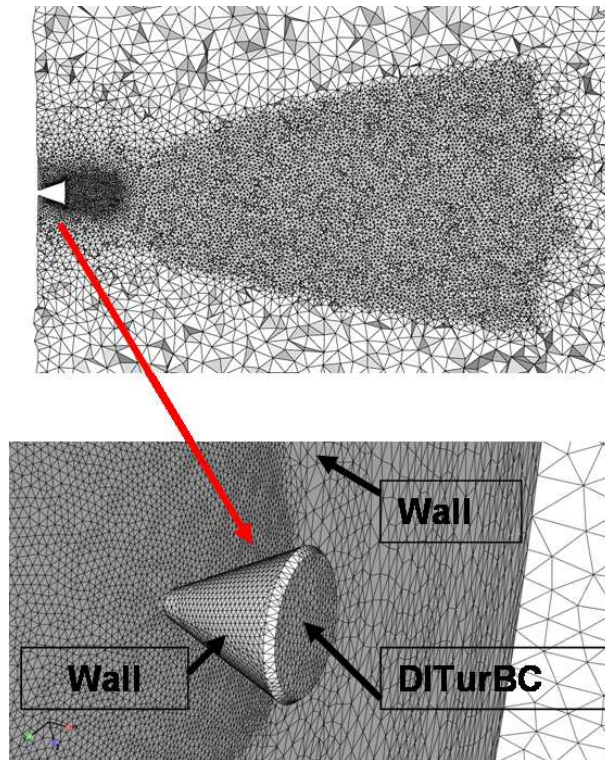


FIG. 6.1 – Présentation du cône sur lequel est appliquée DiTurBC

devrait dépendre de la largeur du spray mais un cône générique est utilisé pour toutes les simulations dans ce manuscrit. La largeur a été fixée à  $2mm$  afin d'être suffisamment importante pour tous les sprays simulés. De même la distance de la condition limite est de  $Dist = 2mm$  avec  $Dist > 10D_{exit}$  pour toutes les injections.

Pour une simulation de moteur à injection directe, l'utilisation d'un tel maillage pourrait poser des difficultés de mise en place. Ce point sera discuté en chapitre 8 dans le cas du calcul moteur.

Un autre problème concerne l'injection de gaz. Ce gaz provient en fait de l'entraînement du spray entre la sortie de l'injecteur et la condition limite mais pas de l'injecteur qui n'injecte que du carburant. Dans un calcul moteur, une masse de gaz est donc injectée en plus de la masse enfermée. Néanmoins, il s'avère que cette masse est très faible comparée à une masse enfermée. Par exemple, si l'on prend un moteur Diesel à injection directe à  $4000tr/min$  en pleine charge, la masse enfermée est de l'ordre de  $1500mg$  et la masse de carburant injecté  $m_{inj}$  est d'environ  $100mg$ . D'après les hypothèses de DiTurBC, la vitesse du gaz sur la condition limite est la même que le liquide. Ainsi, le débit de gaz est de l'ordre de

grandeur du débit de liquide corrigé du rapport de densité. La masse de gaz injectée est donc d'environ  $m_{inj}\rho_g/\rho_l = 3.6mg$  avec  $\rho_l = 830kg.m^{-3}$  et  $\rho_g = 30kg.m^{-3}$ , soit une variation de 0.25% ce qui est négligeable. DITurBC est donc parfaitement utilisable en condition réaliste et ne modifie pas la masse enfermée.





## **Troisième partie**

### **Validation**



## **Introduction - Validation et analyse de la dynamique du spray : comparaison avec la manipulation de Chaves**

Ce chapitre est tiré de l'article "A study of the Diesel spray dynamics using Eulerian-Eulerian Large Eddy Simulation" soumis pour publication dans la revue *i.e.* International Journal of Multiphase Flow. (Martinez et al. 2010b)

Afin de valider le modèle diphasique Eulérien d'AVBP adapté à l'injection Diesel, des calculs 3D sont réalisés dans des conditions de type Diesel basse pression. Il s'agit de l'expérience de Chaves et al. (2004) dont les données permettent la comparaison avec le calcul. Ces calculs sont réalisés avec le modèle de condition limite DITurBC et une étude de sensibilité sur les paramètres importants de DITurBC est proposée. Les données expérimentales disponibles ne permettent pas de valider complètement le spray simulé. Pour aller plus loin, les résultats de simulation sont également comparés à des données expérimentales, disponibles dans la littérature, sur des jets turbulents de gaz. La notion d'auto-similarité dans le spray est notamment étudiée.

L'article est présenté ci-après dans sa version soumise pour publication.

### **6.4 Abstract**

The Large Eddy Simulation (LES) of Diesel Spray using an Eulerian-Eulerian approach is conducted and discussed. A two-fluid model based on the Mesoscopic Eulerian Formalism (MEF) is presented with the inclusion of collision effects inspired from the kinetic theory. The main objective of this study is to evaluate the ability of LES for Diesel sprays and to analyse the dynamics of both the gas and the liquid phases. The validation of the model is obtained through comparison with an experiment of Diesel fuel sprays in dense air. Mean axial spray velocity and its rms fluctuations are analysed for different pressures in the chamber and a sensitivity study on boundary conditions is discussed. The spray dynamics is deeply analysed by comparison with experimental results from the literature on turbulent gaseous jets. The analysis is focused on self-similarity and a comparison between a free gaseous jet and a spray is suggested.

### **6.5 Introduction**

Nowadays, a better understanding of the combustion instabilities and cyclic variabilities in Internal Combustion (IC) engine is essential for car manufacturers. The non-deterministic character of the turbulence is one of the phenomena leading to the cyclic variability. It corresponds to the microscopic events that can influence the instantaneous velocity field and the local mixture leading to different heat release, pollutant levels and engine work from cycle to cycle (Ozdor et al. 1994). Computational Fluid Dynamics (CFD) is

---

a helpful tool for studying such issues. The RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) approach (Lauder and Spalding 1972) is commonly used in CFD to perform 3D simulations (Drake and Haworth 2007). However, although it is characterised by reasonable computational costs, it does not allow the study of cyclic variabilities : RANS calculation of a given engine operation point represents the statistical average of many cycles at this point. Large Eddy Simulation (LES) is better adapted for such studies, as one LES of a given engine operation point may be view as one realization of one engine cycle. Computing local and instantaneous filtered properties (Sagaut 1998), LES has demonstrated its capabilities in many configurations (Selle et al. 2006; Schmitt et al. 2007) and in particular in multi-cycle simulation of IC engine (Richard et al. 2007; Vermorel et al. 2007; Vermorel et al. 2009).

Due to its potential to resolve large scale vortices and so to predict the interaction between drops and air (carrier phase), LES is also of great interest for spray simulations (Bellan 2000). Indeed, the level of turbulence intensity generated by the spray as well as the local composition of the gas mixture including fuel vapour are of critical importance for the combustion and pollutants production in IC engines.

The present study is devoted to the analysis of the spray dynamics using two-fluid Large Eddy Simulation. The liquid phase is described using an Eulerian approach, preferred to the Lagrangian particle tracking method for its potential to model complex industrial two-phase flows with high particles load and high computational efficiency on massively parallel computer. Few publications have been devoted to the Eulerian-Eulerian simulation of sprays in realistic Diesel injection conditions (Iyer and Abraham 1997; Iyer and Abraham 1998; Iyer and Abraham 2005; Truchot and Magnaudet 2005). Furthermore all these works concern RANS simulation. Therefore, is it of interest to investigate how the Eulerian-Eulerian LES for Diesel sprays compares with existing experimental data.

The Mesoscopic Eulerian Formalism (MEF) (Fevrier et al. 2005) is used here for the liquid phase. The physics of the Diesel spray imposes to take into account particle-particle interactions which are difficult to model in an Eulerian approach. Here, based on the work of (Boelle et al. 1995) inspired from the kinetic theory, binary bouncing collisions are accounted for.

The validation of the model is obtained through comparison with the experimental data of (Chaves et al. 2004). A sensitivity study on the inflow turbulent boundary condition is also discussed as it can highly impact the development of the spray.

The Diesel spray is a transient, fully turbulent, two-phase flow and is consequently difficult to study experimentally and theoretically. Few detailed experimental data are available in realistic Diesel injection conditions. Consequently, it seems worthwhile to study, in addition, LES spray results by analogy with the turbulent gaseous jet. This analogy has been examined by different authors (Dent 1971; Spalding 1979; Kuo and Bracco 1982; Wu et al. 1984) because, contrary to the turbulent statistics of the spray, those of the jet have been largely investigated. One interesting point in jet flow is the self-similarity which has been confirmed by experiments (Wygansky and Fielder 1969; Panchapakesan and Lumley 1993; Hussein et al. 1994). For the spray, the self-similarity is used by different researchers as hypothesis



in their spray models (Desantes et al. 2006; Desantes et al. 2007; Martinez et al. 2010a) even if the identification of self-similar regions is not strictly established. With our LES, we should be able to investigate by an analysis of the dynamics of both the gas and the liquid phases, the existence of these regions.

The paper is organised as follows. First, the governing equations for LES are presented for both the gas and the liquid phase. The modelling and closure terms are also defined and discussed in the framework of Direct Injection. Then, the simulation of the configuration of Chaves et al. (2004) is presented and a comparison between experimental data and numerical results is done. A sensitivity study on the boundary conditions is additionally proposed in order to find out the important parameters influencing the development of the spray. Finally, an extensive analysis of the behaviour of the droplets and the entrained gas is suggested by means of the turbulent statistics and focusing on self-similarity.

## 6.6 Governing equations and modelling

Both gas and liquid phases are simulated using an Eulerian formulation (Eulerian-Eulerian approach) and are two-way coupled through the drag force. No mass nor heat transfer are considered because the simulations concern only the non vaporising spray. The Eulerian conservation equations for the liquid are based on the Mesoscopic Eulerian Formalism developed by (Fevrier et al. 2005) and extended to dense sprays by the addition of collision effects.

### 6.6.1 Carrier phase

In a LES approach, only the large scale eddies are resolved whereas the small scale eddies are modelled. Differentiation between large and small scale structures is done by filtering, defined as a convolution product of any variable  $f$  with a spatial filter kernel  $G_{\Delta_f}$  of characteristic length  $\Delta_f$ . The filtered quantity is then written as :

$$\bar{f}(x) = \int f(x)G_{\Delta_f}(x'-x)dx' \quad (6.1)$$

The Favre average is commonly used and allows to avoid density fluctuations. The Favre filtered quantity  $\tilde{f}(x)$  is written as :

$$\bar{\rho}\tilde{f}(x) = \int \rho f(x)G_{\Delta_f}(x'-x)dx' \quad (6.2)$$

where  $\bar{\rho}$  is the filtered density. From now on and for the sake of simplicity the filtered density will be written  $\rho$  in the paper. The subscript  $_g$  will refer to the gas phase whereas  $_l$  will refer to the liquid phase. Applying this filtering on the Navier-Stokes equations leads to the filtered equations of respectively mass, momentum and energy :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_g + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_g\tilde{U}_{g,i} = 0 \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g \tilde{U}_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_g \tilde{U}_{g,i} \tilde{U}_{g,j} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\tau}_{g,ij} - \bar{F}_{drag} - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{g,ij} \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g \tilde{E}_g + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_g \tilde{E}_g + \bar{P}) \tilde{U}_{g,j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\tau}_{g,ij} \tilde{U}_{g,j} - \bar{F}_{drag} \tilde{U}_{l,i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{q}_{g,j} - \frac{\partial}{\partial x_j} Q_{g,j} \quad (6.5)$$

where  $\tilde{U}_{g,i}$  is the filtered velocity, and  $\tilde{E}_g$  is the filtered total non chemical energy.  $\bar{P}$  is the filtered pressure,  $\bar{\tau}_{g,ij}$  the filtered viscous stress tensor and  $T_{g,ij} = 2\rho_g \mu_t \sqrt{2\tilde{S}_{g,ij}\tilde{S}_{g,ij}\tilde{S}_{g,ij}}$  is the subgrid scale tensor or Reynolds tensor where  $\tilde{S}_{g,ij}$  is the strain rate tensor of the carrier phase :

$$\tilde{S}_{g,ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{U}_{g,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_{g,j}}{\partial x_i} \right) \quad (6.6)$$

The subgrid or eddy viscosity  $\mu_t$  is modelled via the dynamic Smagorinsky model of [Germano et al. \(1991\)](#). The filtered heat flux is denoted  $\bar{q}_{g,j}$  while the term  $Q_{g,j}$  is the subgrid scale heat flux.  $\bar{F}_{drag}$  is the filtered drag force, detailed in Section 6.6.2.

The set of equations (6.3)-(6.5) is based on the assumption that there is no effect of liquid volume on the carrier phase behaviour. This hypothesis implies thin spray. Furthermore, another hypothesis is that there is no modification of the carrier phase Reynolds tensor  $T_{g,ij}$  due to the interaction with the liquid phase.

## 6.6.2 Dispersed phase

The Eulerian conservation equations are presented here for non evaporating sprays and without atomisation nor coalescence. The collision are nevertheless taken into account (see Section 6.6.2).

### Mesoscopic Eulerian formalism

The Mesoscopic Eulerian Formalism of [Fevrier et al. \(2005\)](#) accounts for the Random Uncorrelated Motion (RUM) detailed below and was first developed for diluted two-phase flow.

In a cloud of particles, different velocities may be found at close locations, depending on the particle histories. The instantaneous velocity  $V^{(k)}(t)$  of a particle  $k$  located at position  $X^{(k)}(t)$  may be decomposed into a statistical instantaneous Eulerian component shared by all the particles (the correlated velocity  $\check{u}_p(t)$  or Mesoscopic Eulerian Velocity) and a residual velocity component, specific to the particle (uncorrelated velocity (RUM)  $\delta u_p^{(k)}(t)$ ) :

$$V^{(k)}(t) = \check{U}_l \left( X^{(k)}(t), t \right) + \delta u_p^{(k)}(t) \quad (6.7)$$

The contribution of the RUM is described *via* a probability density function (pdf) conditioned on one realization of the carrier phase. The principle for the establishment of the Eulerian liquid transport equation is similar to the derivation of the Navier-Stokes equations by the kinetic theory (Chapman and Cowling 1939). These equations are obtained by integration over the phase space of the Boltzmann-type equation of evolution of the pdf (Fevrier et al. 2005; Riber et al. 2006; Moreau et al. 2005).

Then the Favre filter is applied to the transport equations of droplets to obtain the Eulerian filtered equations used in LES. The Favre operator is similar to the one used for the gas, replacing the density  $\rho_g$  by the particle number density  $n_l$  :

$$\bar{n}_l \widehat{f}(x) = \int n_l f(x) G_{\Delta_f}(x' - x) dx' \quad (6.8)$$

where  $n_l$  is the number density.

Finally, the following conservation equations of number density and mass are obtained :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{n}_l \widehat{U}_{l,i} = 0 \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} = 0 \quad (6.10)$$

where the filtered liquid volume fraction is defined as  $\bar{\alpha}_l = \bar{n}_l \pi d^3 / 6$ ,  $\rho_l$  is the mass density of the liquid (considered constant),  $\widehat{U}_l$  is the filtered correlated velocity and  $d$  is the particle diameter. The filtered momentum equation is :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} \widehat{U}_{l,j} = \bar{F}_{drag} - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{l,ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{\delta \Sigma}_{l,ij} \quad (6.11)$$

The drag force is written as :

$$\bar{F}_{drag} = \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\tilde{U}_{g,i} - \widehat{U}_{l,i}) \quad (6.12)$$

where  $\tau_p$  is the Stokes characteristic time defined from the particle Reynolds number  $R_e$  and the drag coefficient  $C_D$ . The expression of (O'Rourke 1981; Andrews and O'Rourke 1996) is used for  $C_D$  :

$$\tau_p = \frac{4 \rho_l}{3 \rho_g} \frac{d}{C_D |V_r|} \text{ with } C_D = \frac{24}{R_e} (\alpha_g^{-2.65} + 0.15 R_e^{0.687} \alpha_g^{-1.78}) \text{ and } R_e = \frac{\rho_g d |V_r|}{\mu_g} \quad (6.13)$$

where  $\alpha_g = (1 - \alpha_l)$  is the gas volume fraction,  $\mu_g$  is the fluid molecular dynamic viscosity,  $|V_r| = |\tilde{U}_g - \widehat{U}_l|$  is the relative velocity between gas and liquid. The  $\alpha_g$ -dependence of  $C_D$  corresponds with that found in the experiment of (Richardson and Zaki 1954).

$T_{l,ij}$  is the particle subgrid stress tensor. The last term of the right hand side (rhs) of Eq. (6.11) is the flux of the filtered stress tensor  $\widehat{\delta\Sigma}_{l,ij} = -\frac{2}{3}\bar{\alpha}_l\rho_l\widehat{\delta\theta}_l\delta_{ij} - \bar{\alpha}_l\rho_l\widehat{\delta R}_{l,ij}^*$ . It is based on the deviatoric part of the Random Uncorrelated Velocity (RUV) tensor  $\widehat{\delta R}_{l,ij}^*$  and the filtered Random Uncorrelated Energy (RUE)  $\widehat{\delta\theta}_l$ , defined as the half of the RUV tensor trace (Simonin et al. 2002) and (Kaufmann 2004). The term  $2/3\bar{\alpha}_l\rho_l\widehat{\delta\theta}_l = P_{RUV}$  is a dilatation term that plays a role similar to a pressure term. A transport equation may be written for RUE as :

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\alpha}_l\rho_l\widehat{\delta\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\bar{\alpha}_l\rho_l\widehat{\delta\theta}_l\widehat{U}_{l,i} = -2\frac{\bar{\alpha}_l\rho_l}{\tau_p}\widehat{\delta\theta}_l - \frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\alpha}_l\rho_l\widehat{\delta K}_{l,ij} + \widehat{\delta\Sigma}_{l,ij}\frac{\partial}{\partial x_j}\widehat{U}_{l,i} + \Pi_{\delta\theta_l} \quad (6.14)$$

The first term of the rhs is the RUE loss by drag force. It means that particles which are submitted to the carrier phase influence tend to have the same velocity. The second term is a diffusion term while the third term is a production term by shear and compression. The fourth term is a production term by subgrid scales.

### Closure models for Random Uncorrelated Motion

The RUV tensor  $\widehat{\delta R}_{l,ij}^*$  and the term  $\widehat{\delta K}_{l,ij}$  of Eq. (6.14) are modelled, respectively, by a viscous assumption and by a diffusion term similar to Fick's law (Kaufmann 2004) :

$$\widehat{\delta R}_{l,ij}^* = -2\widehat{\nu}_{RUV}\left(\widehat{S}_{l,ij} - \frac{\widehat{S}_{l,mm}\delta_{ij}}{3}\right) = -2\widehat{\nu}_{RUV}\widehat{S}_{l,ij} \quad (6.15)$$

$$\widehat{\delta K}_{l,ij} = -\widehat{\kappa}_{RUV}\frac{\partial\widehat{\delta\theta}_l}{\partial x_j} \quad (6.16)$$

where  $\widehat{S}_{p,ij}$  is the strain-rate tensor defined as :

$$S_{l,ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\widehat{U}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\widehat{U}_{l,j}}{\partial x_i}\right) \quad (6.17)$$

The viscosity  $\widehat{\nu}_{RUV}$  and the diffusion coefficient  $\widehat{\kappa}_{RUV}$  are modelled as :

$$\widehat{\nu}_{RUV} = \frac{\tau_p}{3}\widehat{\delta\theta}_l \quad (6.18)$$

$$\widehat{\kappa}_{RUV} = \frac{10}{27}\tau_p\widehat{\delta\theta}_l \quad (6.19)$$

These models have been validated in an *a priori* study based on gas particle homogeneous isotropic turbulence (Moreau et al. 2005).

### Closure models for subgrid terms

Models proposed by [Moreau et al. \(2005\)](#) and [Riber et al. \(2005\)](#) for subgrid terms are used for the computations. Because of the high compressibility of the dispersed liquid phase, the subgrid scale (SGS) tensor  $T_{l,ij}$  is decomposed into two parts. The diagonal part is equivalent to a subgrid pressure  $P_{SGS}$  proportional to the subgrid energy and the non-diagonal part equivalent to a subgrid viscous tensor  $T_{l,ij}^*$  :

$$T_{l,ij} = \underbrace{C_l 2\Delta_f^2 \bar{\alpha}_l \rho_l |\hat{S}_l|^2 \delta_{ij}}_{P_{SGS}} - \underbrace{C_s 2\Delta_f^2 \bar{\alpha}_l \rho_l |\hat{S}_l| \left( \hat{S}_{l,ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \hat{S}_{l,kk} \right)}_{T_{l,ij}^*} \quad (6.20)$$

with  $|\hat{S}_l|^2 = 2\hat{S}_{l,ij}\hat{S}_{l,ij}$ . These models have been validated *a priori* in gas particle homogeneous isotropic turbulence ([Moreau et al. 2005](#)) and the values  $C_s = 0.02$  et  $C_l = 0.012$  were found.

The RUE production by subgrid scales  $\Pi_{\delta\theta_l}$  is obtained by assuming that the correlated energy dissipated by subgrid effect is totally converted into RUE and the drag effect is negligible [Riber et al. \(2006\)](#). This leads to the relation :

$$\Pi_{\delta\theta_l} \approx -T_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} \quad (6.21)$$

### Extension to dense sprays : collision effects

The closure for RUV terms are linked to the drag force. For non-colliding particles, the increase or decrease of uncorrelated motion is due to the interaction with the carrier phase. For instance, small size droplets approach the same velocity which is the velocity of the carrier phase. Then, the uncorrelated energy decreases. On the other hand, the uncorrelated motion can be produced by shear or compression. Under the influence of vortices, the behaviour of droplets depends on their size and then their trajectories can be different. This could produce uncorrelated motion.

Thus, the drag force is the predominant effect which is taken into account for the evolution of the RUM. This hypothesis is only valid when the relaxation time is the minimum relevant time scale. In the dense zone of the spray, the collision time can be smaller than the relaxation time. It means that the droplet does not have the time to be influenced by the carrier phase. Therefore one has to adapt the equation and hypothesis for the closure of the RUV terms in order to take into account the collision effects. For this purpose an analogy is proposed between the RUE and the granular temperature often used in fluidized beds simulation. One hypothesis is that the collisions are only binary, slightly inelastic and purely bouncing. Therefore coalescence is omitted and the model should be improved for this case. This point is highly questionable in non evaporating sprays. The coalescence can appear far from the nozzle exit and can lead to an increase in the mean diameter. In evaporating spray, in real IC engines conditions, the characteristic time of evaporation is so small, compared to a flow through time, that coalescence is negligible.

The model used here has been validated on simple shear dense suspensions (Boelle et al. 1995). The principles and developments of the model is reviewed by Peirano and Leckner (1998). The collision time (Chapman and Cowling 1939) reads :

$$\tau_c = \frac{d}{24g_0\bar{\alpha}_l} \sqrt{\frac{3\pi}{2\widehat{\delta\theta}_l}} \quad \text{with} \quad g_0 = \left(1 - \frac{\bar{\alpha}_l}{\alpha_m}\right)^{-2.5\alpha_m} \quad (6.22)$$

where  $g_0$  is the radial distribution function (Lun and Savage 1986) with  $\alpha_m = 0.6$ .

The collision effects change the modelling of the RUV viscosity and diffusion defined in Eq. (6.18) and Eq. (6.19) to introduce the collisional time. The subscript c is used for the corrected kinematic terms  $\nu_{RUV_c}$  and  $\kappa_{RUV_c}$

$$\widehat{\nu}_{RUV_c} = \frac{\tau_p \widehat{\delta\theta}_l}{3} \left(1 + \bar{\alpha}_l g_0 \frac{2}{5} (1+e)(3e-1)\right) \frac{1}{\left(1 + \frac{\tau_p (1+e)(3-e)}{10\tau_c}\right)} \quad (6.23)$$

$$\widehat{\kappa}_{RUV_c} = \frac{2}{3} \widehat{\delta\theta}_l \frac{\left(1 + \bar{\alpha}_l g_0 \frac{3}{5} (1+e)^2 (2e-1)\right)}{\left(\frac{9}{5\tau_p} + \frac{(19-33e)(1+e)}{100\tau_c}\right)} \quad (6.24)$$

where  $e$  is the restitution coefficient which is set to a fixed arbitrary value  $e = 0.9$ . The influence of  $e$  on the stress has already been studied by different authors (Campbell 1989; Hopkins and Louge 1991). Additional terms, linked to collision effects also appear like the collisional stress tensor  $\widehat{\delta\Sigma}_{l,ij}^{coll}$  and a collisional diffusion term  $\widehat{\delta K}_{l,ij}^{coll}$  which are modelled similarly to the kinematic terms  $\widehat{\delta\Sigma}_{l,ij}$  and  $\widehat{\delta K}_{l,ij}$ , *i.e.* respectively by a Boussinesq assumption and by a diffusion term similar to Fick's law :

$$\widehat{\delta\Sigma}_{l,ij}^{coll} = -\left(\widehat{P}_{coll} - \widehat{\xi}_c \widehat{S}_{l,kk}/3\right) \delta_{ij} + 2\bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\nu}_{coll} \widehat{S}_{l,ij}^* \quad (6.25)$$

$$\widehat{\delta K}_{l,ij}^{coll} = -\widehat{\kappa}_{coll} \frac{\partial \widehat{\delta\theta}_l}{\partial x_j} \quad (6.26)$$

where  $\widehat{\nu}_{coll}$  is the collisional viscosity (Boelle et al. 1995) :

$$\widehat{\nu}_{coll} = \left(\frac{4}{5} \bar{\alpha}_l g_0 (1+e) \left(\widehat{\nu}_{RUV_c} + d \sqrt{\frac{2\widehat{\delta\theta}_l}{3\pi}}\right)\right) \quad (6.27)$$

$\widehat{\kappa}_{coll}$  is the collisional diffusivity :

$$\widehat{\kappa}_{coll} = \bar{\alpha}_l g_0 (1+e) \left(\frac{6}{5} \kappa_{RUV_c} + \frac{4}{3} d \sqrt{\frac{2\widehat{\delta\theta}_l}{3\pi}}\right) \quad (6.28)$$

## 6.6 Governing equations and modelling

$\widehat{P}_{coll}$  is the collisional pressure :

$$\widehat{P}_{coll} = \frac{4}{3} \bar{\alpha}_l^2 \rho_l g_0 (1+e) \widehat{\delta\theta}_l \quad (6.29)$$

$\widehat{\xi}_c$  is the bulk viscosity :

$$\widehat{\xi}_c = \frac{4}{3} \bar{\alpha}_l^2 \rho_l g_0 (1+e) d \sqrt{\frac{2\widehat{\delta\theta}_l}{3\pi}} \quad (6.30)$$

The new model for stress and diffusive tensors, taking into account collision effects are :

$$\delta\Sigma_{l,ij}^{tot} = - \left( \widehat{P}_{RUV} + \widehat{P}_{coll} - \widehat{\xi}_c \widehat{S}_{l,kk}/3 \right) \delta_{i,j} + 2\bar{\alpha}_l \rho_l (\widehat{v}_{RUVc} + \widehat{v}_{coll}) \widehat{S}_{l,ij}^* \quad (6.31)$$

and

$$\widehat{\delta K}_{l,ij}^{tot} = - (\widehat{\kappa}_{RUVc} + \widehat{\kappa}_{coll}) \frac{\partial \widehat{\delta\theta}_l}{\partial x_j} \quad (6.32)$$

Thus Eq. (6.11) and Eq. (6.14) become respectively :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{U}_{l,i} \widehat{U}_{l,j} &= \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\widehat{U}_{g,i} - \widehat{U}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{l,ij}^* - \frac{\partial}{\partial x_i} P_{SGS} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} \widehat{P}_{RUV} - \frac{\partial}{\partial x_i} \widehat{P}_{coll} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \widehat{\xi}_c \frac{\partial U_{l,k}}{\partial x_k} \right) \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} 2\bar{\alpha}_l \rho_l (\widehat{v}_{RUVc} + \widehat{v}_{coll}) S_{l,ij}^* \end{aligned} \quad (6.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta\theta}_l \widehat{U}_{l,i} &= -2 \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} \widehat{\delta\theta}_l - \bar{\alpha}_l \rho_l \frac{1-e^2}{3\tau_c} \widehat{\delta\theta}_l \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \rho_l \widehat{\delta K}_{l,ij}^{tot} + \widehat{\delta\Sigma}_{l,ij}^{tot} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{U}_{l,i} \\ &\quad + \Pi_{\delta\theta_l} \end{aligned} \quad (6.34)$$

This model can be seen as an extension of the diluted model. When the liquid volume fraction tends to zero, the collisional time tends to infinity and the collisional terms (Eq.(6.27, 6.28, 6.29, 6.30)) naturally tend to zero. Furthermore the kinematic terms from Eq.(6.23,6.24) tend to their value for the diluted case. This model has been validated in Particle-Charged Homogeneous Isotropic Turbulence (Vié et al. 2009) and has also shown a good agreement for Diesel spray penetration in realistic engine conditions (Martinez et al. 2009).

---

## Characteristic time scales for sprays and Stokes number

The ratio of the relaxation time (Eq. 6.13) and the collision time (Eq. 6.22) allows to evaluate the relative impact of the drag force and collisions. The Stokes number introduces an additional time scale, characteristic of the carrier phase, taken here as the characteristic time  $\tau^t$  of the most energetic structures in a gas jet. The expansion of the jet along its axis is proportional to the distance from the jet exit  $X$ . Moreover, the axial velocity on the jet axis decreases like  $1/X$ . Then the turbulent time scale  $\tau^t$  should be proportional to :

$$\tau^t \propto \frac{X^2}{U_{exit} \cdot D} \quad (6.35)$$

where  $U_{exit}$  is the spray velocity at the nozzle exit and  $D$  is the injector diameter. The Stokes number now reads :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau^t} \propto \frac{\tau_p U_{exit} \cdot D}{X^2} \quad (6.36)$$

An interesting point is that, the Stokes number decreases along the spray axis meaning that the droplets will be more influenced by the turbulence downstream of the jet.

## 6.7 Numerical Simulation

### 6.7.1 LES solver

The AVBP code, jointly developed and owned by IFP and CERFACS is used for the simulations. It solves the compressible Navier-Stokes equations for reactive two phase flows (Moureau 2004) with low dissipation schemes adapted to LES (third order in space and time Taylor-Galerkin scheme TTGC (Colin and Rudgyard 2000)). The abilities of AVBP in reactive two-phase flows have been investigated in gas turbine configuration (Boileau et al. 2008) and in multi-cycle IC engine simulation (Richard et al. 2007; Vermorel et al. 2007).

### 6.7.2 Experimental set-up

The experiment of Chaves et al. (2004) is investigated in this study. It corresponds to a Diesel-like liquid injection without cavitation at a moderate pressure ( $\Delta P = 10MPa$ ) into a quiescent dense air ( $3MPa$ ). The injector diameter is  $D = 200\mu m$ . The measurements are done when the injection reaches a quasi-steady state. The Bernoulli velocity is  $154.7m/s$  for this case. The mean and fluctuating (rms) axial velocity profiles are provided at 10D and 100D from the nozzle exit.



### 6.7.3 Parameters of the simulation and boundary conditions

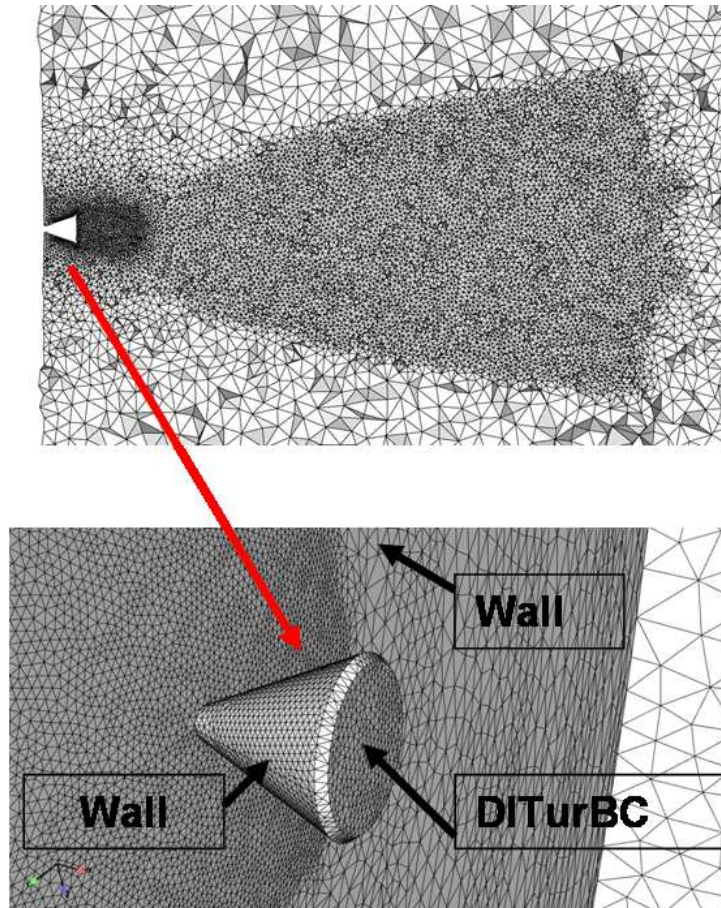


FIG. 6.2 – Cross section of the mesh and view of the cone dedicated to the DITurBC.

The tetrahedral 3D mesh (See Fig. 6.2) is composed of 350000 nodes, with a minimum edge length of  $80\mu\text{m}$ . The numerical parameters of the calculation are presented in Table (6.1).

Scheme :	Two-step Taylor-Galerkin TTGC* *(Colin and Rudgyard 2000)
CFL :	0,7
Time step :	$5.810^{-8}s$
Physical time :	$2.5ms$
CPU time (32 proc. Opteron) :	$35h$

TAB. 6.1 – Numerical parameters of the LES calculations.

The spray is formed by an atomisation process resulting from complex interface phenomena that can not be reproduced with the present model and are not well understood. Therefore the droplets are di-

rectly introduced in the domain, following a procedure described in (Martinez et al. 2010a) and called Downstream Inflow Turbulent Boundary Conditions (DITurBC).

The strategy consists of initiating the 3D simulation at 10D downstream from the nozzle exit. The mean radial profiles of axial velocity, liquid volume fraction and droplet diameters are supposed to be gaussian. The characteristics of the spray at the nozzle exit are calculated using data on nozzle geometry and the turbulent and the cavitating flow inside the nozzle. Then, additional conservation equations of mass and momentum between the nozzle exit and the boundary conditions are used to determine the mean profiles. Gas is also injected to represent the entrainment at the nozzle exit. The gas velocity is supposed to be equal to the liquid velocity. The application of a boundary condition at 10D downstream from the nozzle exit is made possible by the addition, in the geometry, of a solid cone that shifts the inlet boundary condition. The DITurBC model has been validated by comparison with the experiment of Chaves et al. (2004), affording to recover the profiles at 10D. The parameters of the boundary conditions are presented in Table (6.2) for what will be referred as the reference case.

Max. drop velocity :	154m/s
Max. gas velocity :	154m/s
Mean drop velocity :	135m/s
Mean gas velocity :	135m/s
Max. liquid volume fraction :	0.2
Max. Droplet diameter :	20 $\mu$ m
Turbulence intensity :	20%

TAB. 6.2 – Boundary conditions for the reference case.

The physical parameters are presented in Table (6.3).

Ratio of density $\rho_g/\rho_l$ :	0.043
Pressure in the chamber :	30MPa
Injection Pressure :	130MPa
Temperature of the chamber :	293K

TAB. 6.3 – Physical parameters of the simulation for the reference case.

#### 6.7.4 Turbulent boundary conditions

In order to create a turbulent field with a given statistical profile, a non-dimensional homogeneous fluctuating velocity field is generated. This field is then rescaled and added to the mean velocity profile on the DITurBC for both liquid and gas phases. The method is based on the work of Kraichnan (1970) and a similar method is used by Smirnov et al. (2001).

The divergence free, statistically stationary, homogeneous, isotropic, multivariate-normal velocity field, for  $N$  modes, is of the form :

$$v_i(x, t) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^N \left[ p_i^{(n)} \cos \left( k_e \lambda^{(n)} x_j + \omega^{(n)} \right) + q_i^{(n)} \sin \left( k_e \lambda^{(n)} x_j + \omega^{(n)} \right) \right] \quad (6.37)$$

where  $p_i^{(n)} = \epsilon_{ijm} \xi_j^{(n)} \lambda_m^{(n)}$  and  $q_i^{(n)} = \epsilon_{ijm} \zeta_j^{(n)} \lambda_m^{(n)}$ . Here  $\epsilon_{ijm}$  is the permutation tensor used in the vector-product operation. The variables  $\xi_j^{(n)}$ ,  $\zeta_j^{(n)}$  and  $\lambda_j^{(n)}$  are random quantities.  $\xi_j^{(n)}$  and  $\zeta_j^{(n)}$  are calculated from normal distribution  $N(0, 1)$ , *i.e.* with a mean of 0 and a standard deviation of 1.  $\lambda_j^{(n)}$  is calculated from a Gaussian distribution  $G(0, 1/2)$ .

For an infinite number of modes, the energy spectrum is of the form :

$$E(k) = \frac{2}{3} 16 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \frac{k}{k_e} \right)^4 \exp(-2k^2/k_e^2) \quad (6.38)$$

with a maximum energy for  $k = k_e$  and a correlation length of the order  $L_e = 1/k_e$ .

In the paper of [Kraichnan \(1970\)](#),  $\omega^{(n)}$  is obtained from a Gaussian distribution with standard deviation  $\omega_0$  leading to a time correlation of the form  $\exp(-\omega_0^2 t^2/2)$ . Here a different approach is used. Instead of generating a 2D inlet field varying with time, a 3D field, *i.e.* 2D inlet + direction perpendicular to the inlet, is generated. At each time  $t$ , the field corresponding to the 2D section located at  $U_{conv} \cdot t$  upstream from the inlet section (in the direction perpendicular to the inlet) is injected, where  $U_{conv}$  is the mean velocity in direction perpendicular to the inlet plane. One can view the turbulent velocity field as velocity fluctuations in a grid turbulence with mean velocity  $U_{conv}$ .

From the homogeneous isotropic turbulent velocity field, an inhomogeneous fluctuating target velocity  $U_i^T$  is created to reproduce the statistical mean velocity  $\langle U_i \rangle$ , the Root-Mean-Square (RMS) fluctuations  $\sqrt{\langle u_i'^2 \rangle}$  and the cross correlations  $\langle u_i' u_j' \rangle$ , using the tensor  $a_{ij}$  ([Klein et al. 2003](#)) :

$$U_i^T(x, t) = \langle U_i(x) \rangle + a_{ij}(x) v_j(x, t) \quad (6.39)$$

This allows to obtain an anisotropic field, more relevant for a jet simulation.

The RMS fluctuations  $u_{rms}$ ,  $v_{rms}$ ,  $w_{rms}$  are set to fit the turbulence intensity of a gas jet in the self-similarity area according to [Hussein et al. \(1994\)](#), *i.e.*  $(u_{rms}/\langle U \rangle)_{axis} = 0.25$ ,  $(v_{rms}/\langle U \rangle)_{axis} = 0.20$  and  $(w_{rms}/\langle U \rangle)_{axis} = 0.20$ . For the simulation of the experiment of [Chaves et al. \(2004\)](#), in order not to exceed the Bernoulli velocity and to be in accordance with the experimental results at  $10D$ , the axial velocity fluctuations are set to  $(u_{rms}/\langle U \rangle)_{axis} = 0.2$ . A questionable point here is how to set the level of correlation between the gas and the liquid fluctuations. For the sake of simplicity and in a first approach, no correlation is supposed. This point will be discussed in section 6.8.4.

The amplitude of the velocity fluctuations are supposed equal for the gas and the liquid phase.

## 6.8 Results and analysis of the spray behaviour

The aim of this section is to evaluate the quality of the simulation by comparison with the experimental results of [Chaves et al. \(2004\)](#). The decrease of the mean axial droplet velocity as well as its mean and RMS radial profiles at 100D are studied. The mean and rms values are obtained by performing time averages over more than 10 flow through times in order to have converged statistics.

A sensitivity study on some chosen boundary conditions parameters is proposed. In particular, the influence of the drag force, the turbulence intensity and the density of the air are addressed.

### 6.8.1 Effect of drag

The effect of drag is studied by changing either the maximum diameter of the droplets at injection or the inlet gas velocity at the boundary conditions. These effects are illustrated on Fig. (6.3).

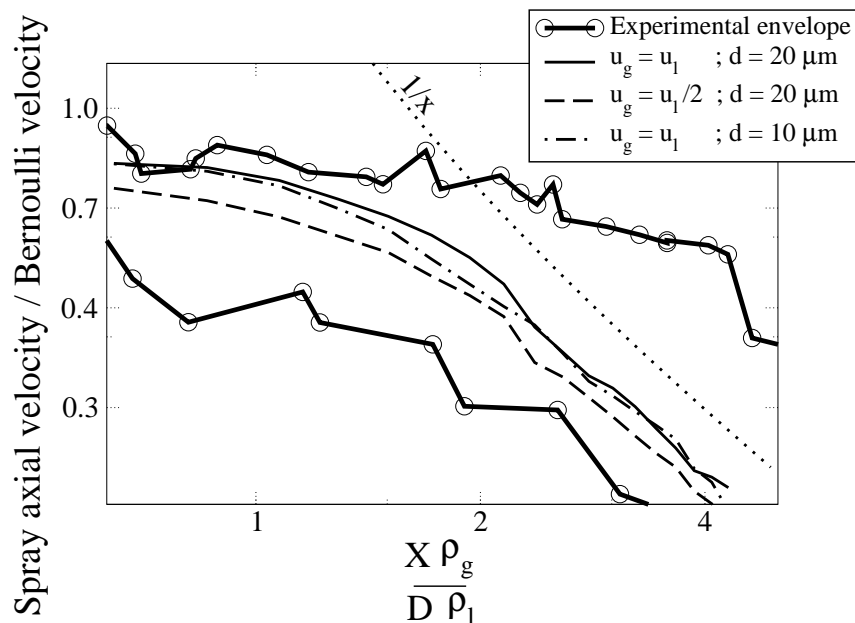


FIG. 6.3 – Decrease of mean axial velocity and effects of the inlet gas velocity.

For the reference case ( $u_g = u_l$  and  $d = 20\mu m$ ), the decrease of the mean axial velocity is within the experimental envelope or extrema. At a normalised distance of  $(X/D)(\rho_g/\rho_l) = 2.5$  ( $X/D \approx 60$ ), the mean axial velocity decreases like  $1/X$  which corresponds to the decrease in a free jet of gas. This behaviour is the same with a maximum droplet diameter of  $10\mu m$  and with a gas velocity equal to half the injected liquid velocity. The simulation is then insensitive to the droplet diameter and the gas velocity at injection.

The radial profiles are depicted on Fig. (6.4).

## 6.8 Results and analysis of the spray behaviour

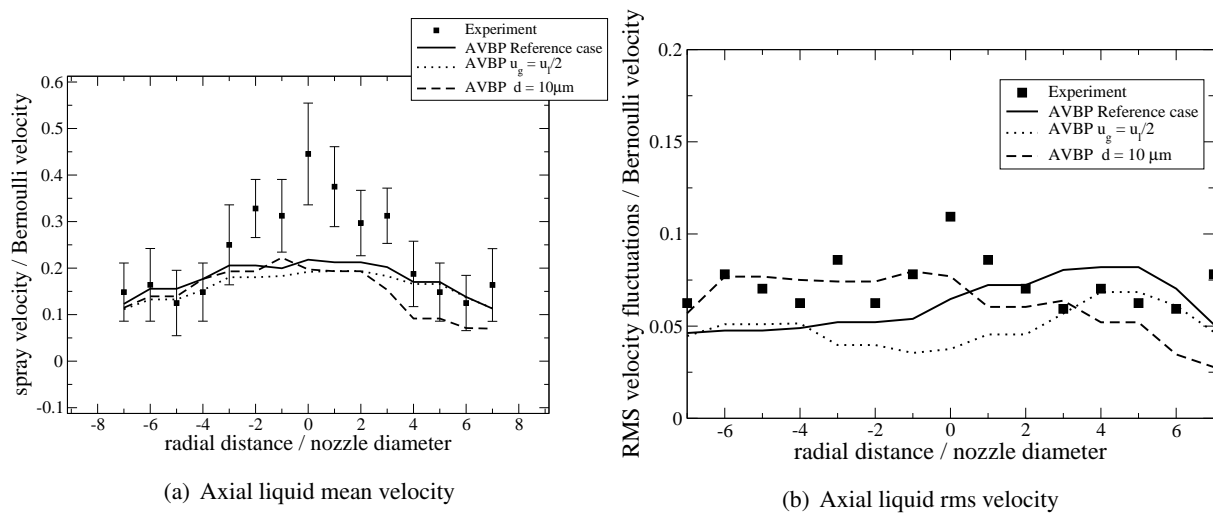


FIG. 6.4 – Radial distribution at  $X/D = 100$  of mean and rms axial velocity. Comparison on the effect of the drag force.

The mean profiles are almost identical for the three cases. The mean axial velocity is under estimated by the simulation compared to the experimental results, especially near the spray axis. At the periphery the comparison is very good. The disagreement is probably due to very large droplets which are not included in our simulation but which could be present in the experiment because they have not been atomised. Due to their inertia, these droplets conserve high velocities and are concentrated near the spray axis. In the experiment of [Chaves et al. \(2004\)](#), the injection pressure is not realistic compared to the injection pressure in real Diesel engine that reach  $200MPa$  and is maybe not high enough to produce small droplets. Then, the effect of large droplets may be expected less important in real engine conditions.

The RMS values show a good agreement with the experiment for the entire radial profiles excepted at the center. The reason is probably the same as described for the mean velocity.

In order to better understand these results, the energy exchange term appearing in Eq. (6.5) is averaged by the spray volume, normalised by its maximum and plotted versus time in Fig. (6.5) together with the evolution of the spray volume.

The exchange of energy is higher at the beginning of the injection when the air begins to be entrained. Then, the exchange term decreases during the simulation proving an equilibrium between the liquid and the gas. This equilibrium is reached rapidly, as at  $t = 2ms$  the exchange term is about 1% of its maximum. The equilibrium between liquid and gas was also noticed experimentally by [Doudou \(2005\)](#) in the central part of the spray.

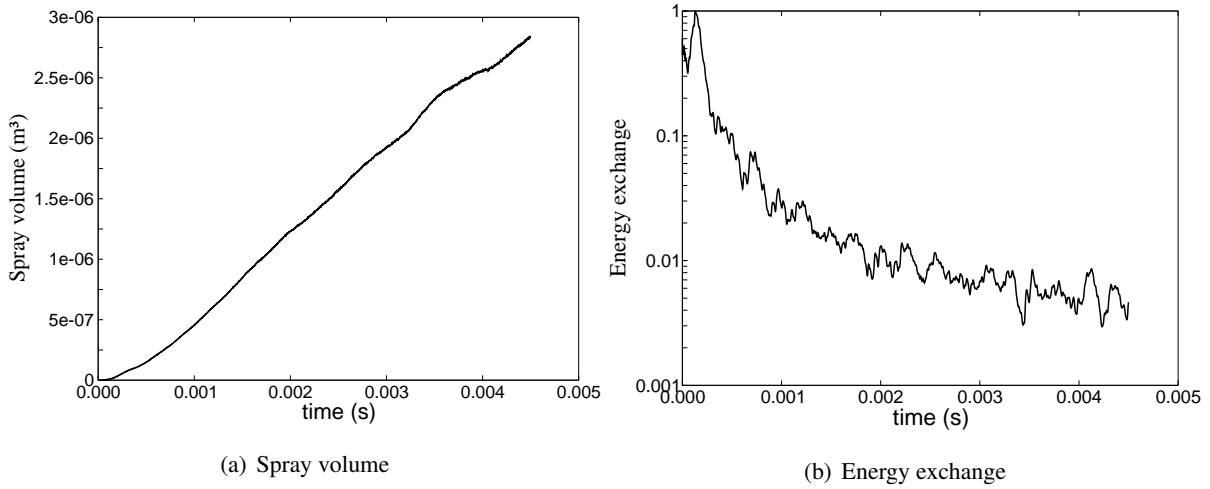


FIG. 6.5 – Evolution of spray volume and energy exchange between phases with time.

### 6.8.2 Effect of the turbulence intensity

Contrary to drag force which seems to have a small influence on the spray development, the turbulence intensity is of first order as it controls the spray opening.

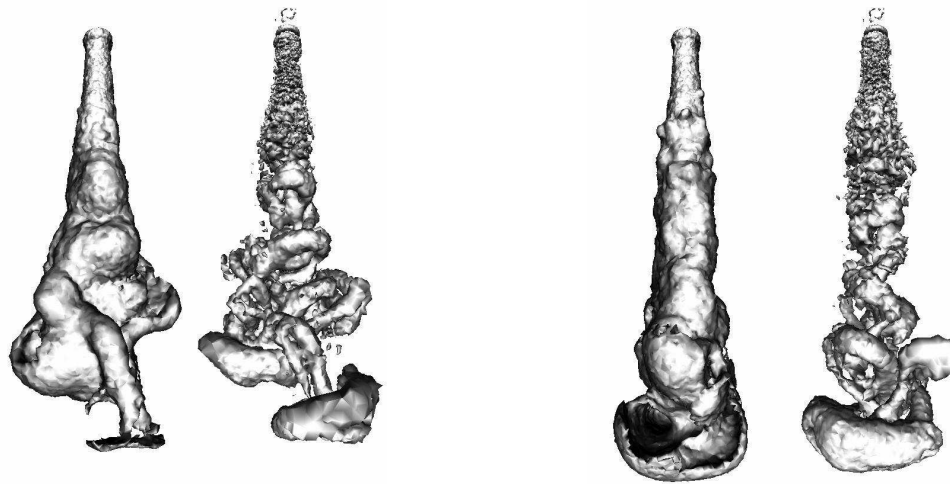
Fig. (6.6) shows an iso-surface of the gas vorticity magnitude and an iso-surface of the liquid volume fraction for different levels of turbulent intensity. With an intensity of  $u_{rms}/\langle U \rangle = 1\%$ , the spray presents small vortices, *i.e.* small structures on the vorticity field, compared to the case of  $u_{rms}/\langle U \rangle = 20\%$ . The development of the turbulent structures is enhanced by the level of intensity. Furthermore the large scales vortices transport droplets to the periphery of the spray and contribute to the spray opening as can be seen on the iso-surface of liquid volume fraction.

By conservation of the axial momentum flux, the spray opening is directly linked to the decrease of the axial velocity (See Fig. (6.7)). As a consequence, the decrease of velocity is less important in the case of low turbulence. Nevertheless, the profiles remain within the experimental extrema. In the case of  $u_{rms}/\langle U \rangle = 1\%$ , the decrease is not proportional to  $1/x$  and thus the spray has not reached the behaviour of a free jet.

Surprisingly, the radial profiles on Fig. (6.8) are more in accordance with the experiment for the case of low turbulence which disagrees with the results on the spray angle. The main reason is probably again the presence of large droplets which have not been atomised have conserved a high velocity in the experiment.

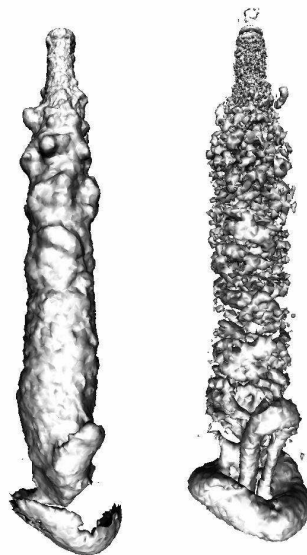
### 6.8.3 Effect of the chamber pressure

The impact of the chamber pressure and consequently of the air density is studied. It has been observed many times that the decrease of the chamber pressure leads to a decrease of the spray angle and



(a) reference case :  $u_{rms}/\langle U \rangle = 20\%$

(b)  $u_{rms}/\langle U \rangle = 10\%$



(c)  $u_{rms}/\langle U \rangle = 1\%$

FIG. 6.6 – Instantaneous iso-surface of the liquid volume fraction (left) and the gas vorticity magnitude (right) for different levels of turbulence at  $t = 2ms$ .

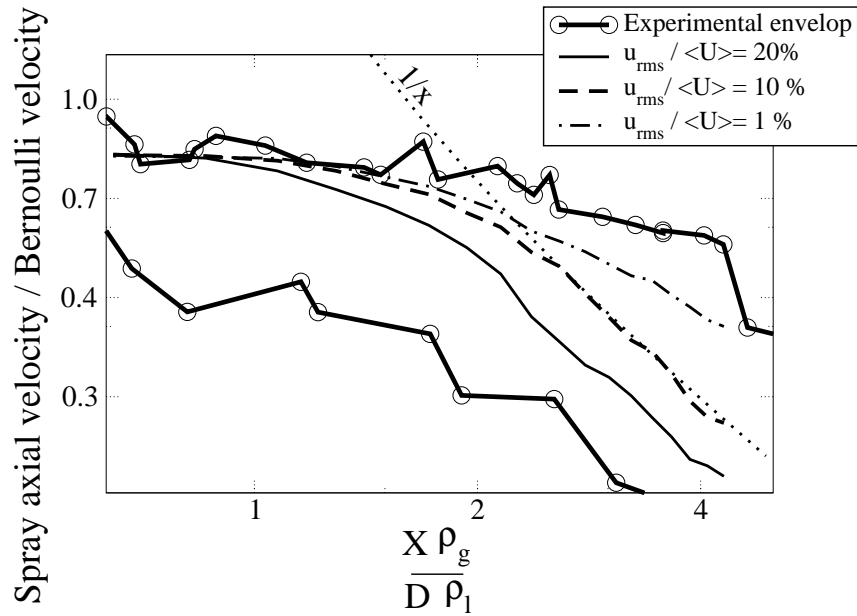


FIG. 6.7 – Decrease of mean axial velocity and effects of the level of turbulence.

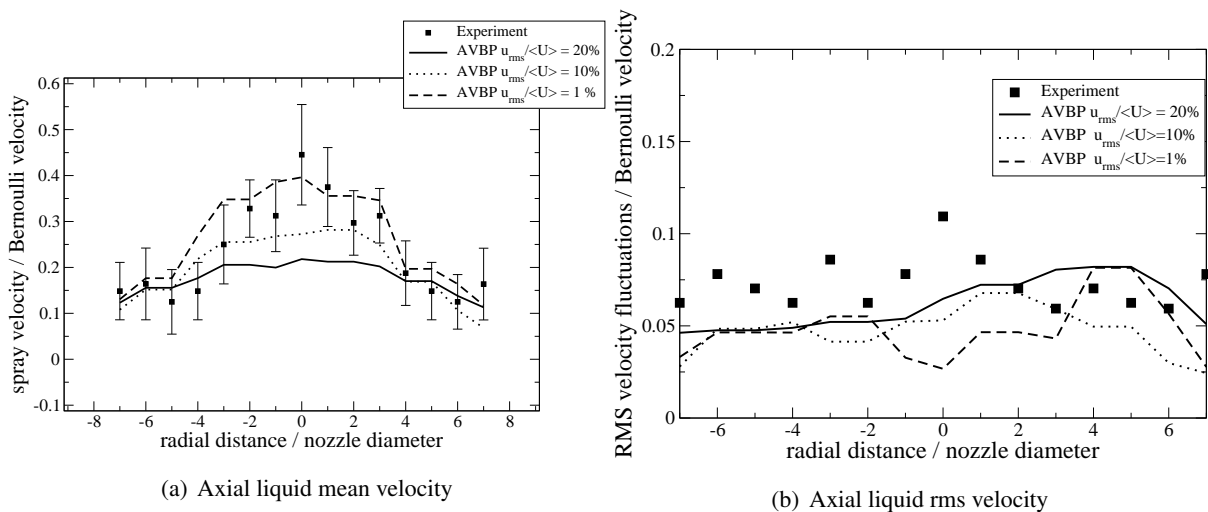


FIG. 6.8 – Radial distribution at  $X/D = 100$  of mean and rms axial velocity. Comparison on the effect of the level of turbulence.



consequently to an increase of the penetration.

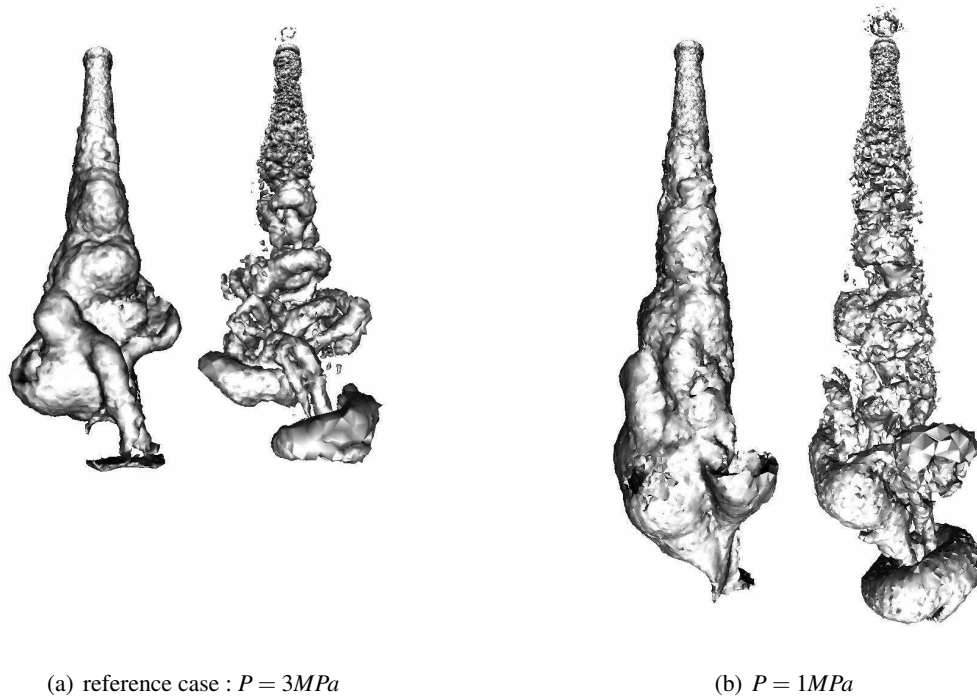


FIG. 6.9 – Instantaneous iso-surface of the liquid volume fraction (left) and the gas vorticity magnitude (right) for different back pressures at  $t = 2ms$ .

Fig. (6.9) shows that the calculations are able to capture these well-known phenomena. The decrease of the axial velocity along the spray axis is presented on Fig. (6.10).

For all the pressures, the liquid velocity decreases like  $1/x$ . According to [Chaves et al. \(2004\)](#), even with a change of the density, the profiles should remain in the experimental envelope. This is the case with the pressure of  $P = 6MPa$ . For the pressure of  $P = 1MPa$ , the decrease is slightly higher than the experimental measurements but the tendency is well predicted.

### 6.8.4 Self-similarity

The Diesel spray is a transient, fully turbulent, two-phase flow and is consequently difficult to study experimentally and theoretically. Few detailed experimental data are available in realistic Diesel injection conditions. Consequently, it seems worthwhile to study, in addition, LES spray results by analogy with the turbulent gaseous jet. [Spalding \(1979\)](#) was one of the first to consider the Diesel spray as a gaseous turbulent jet. [Ouellette and Hill \(2000\)](#) have shown that, by comparison between turbulent gas jets and sprays with the same momentum injection rate and chamber pressure, penetration and mixing rates are closely similar when the spray droplets diameters are small. This result was used by [Bruneaux \(2002\)](#) to study the mixture in Diesel like injection using visualizations in a gaseous fuel jet.

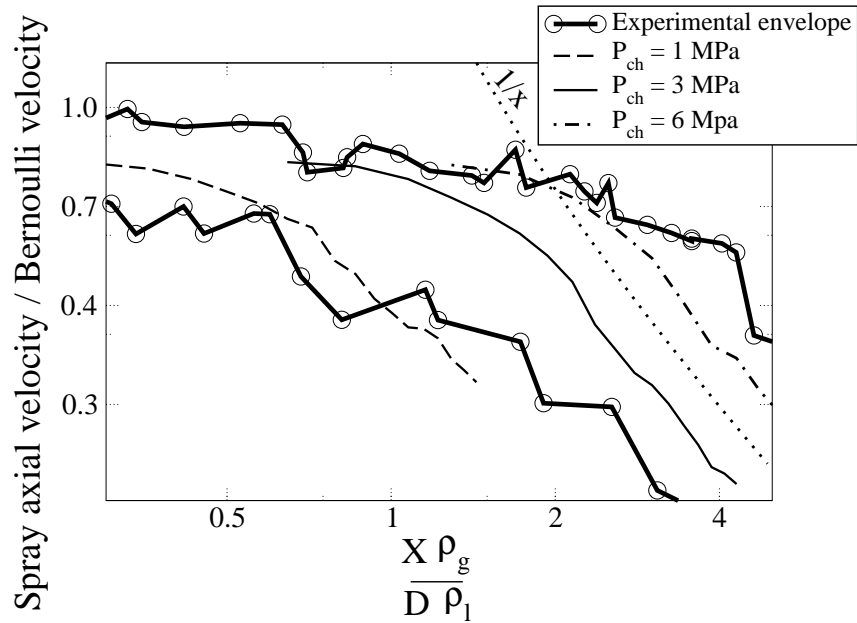


FIG. 6.10 – Decrease of mean axial velocity and effects of the boundary condition parameters.

Many authors (Arcoumanis et al. 1989; Naber and Siebers 1996) have noticed experimental similarities between them or have this property as an assumption in their spray models (Desantes et al. 2006; Desantes et al. 2007).

Here, the sensitivity study presented in Section 6.8.1 shows that, for the reference case, the decrease of velocity is proportional to  $1/x$  at about  $60D$  from the nozzle exit, behaving therefore like a free gas jet. This results was also found by Payri et al. (2008) for higher injection pressures.

To go further in the comparison between a gaseous jet and spray self-similarity is studied for both gas and liquid phases.

To go further, an analogy of behaviour can be deduced by looking at the turbulence intensity. By definition, in a gas jet, self-similarity is reached when the turbulence intensity stays constant along the spray axis. The turbulence intensity along the axis and for the three components are depicted on Fig. (6.11) for the gas phase and the liquid phase. The evolution of the ratio between the turbulent kinetic energy  $k$  and the mean kinetic energy  $\langle K \rangle$  is also presented. The main point is that from  $X/D = 125$ , the turbulence intensity in the axial direction  $(u_{rms}/\langle U \rangle)_{axis}$  is approximately constant for the gas. The ratio of energy is also approximately constant. The other components reach self-similarity at  $X/D = 125$  for  $v_{rms}$  or  $X/D = 150$  for  $w_{rms}$ . For the turbulent energy the similarity is reached at  $X/D = 125$ . The same conclusions hold for the liquid phase as both figures look very much the same. The fact that self-similarity is reached sooner for the axial fluctuation was also observed by Wygnansky and Fielder (1969) for a gaseous jet. Their experimental results give :

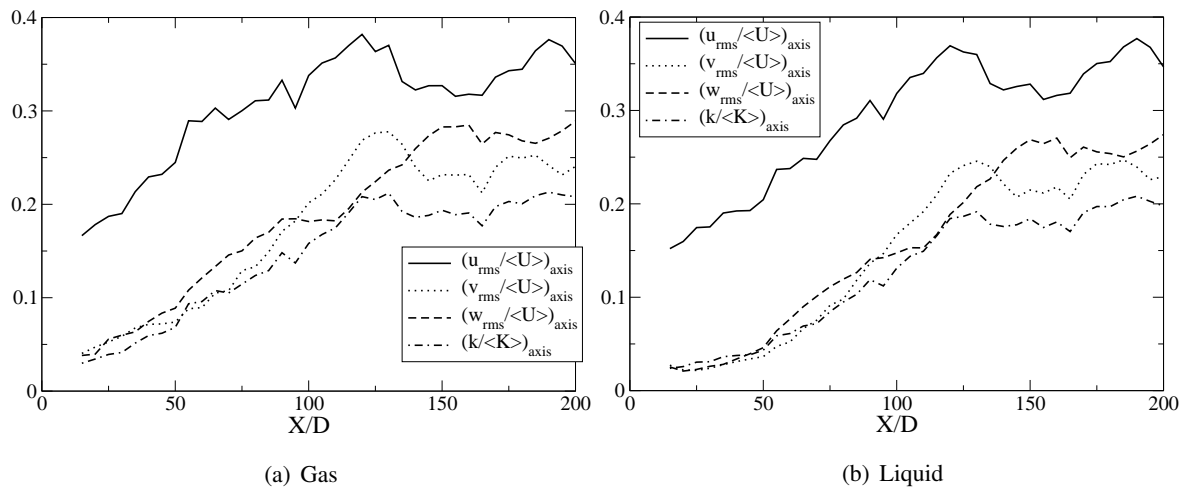


FIG. 6.11 – Evolution of the turbulence intensity along axis for liquid and gas phase.

$$(u_{rms} / \langle U \rangle)_{axis} \approx 0.29 \text{ to } 0.27 \text{ for } X/D = 40 \text{ to } 96 \quad (6.40)$$

$$(v_{rms} / \langle U \rangle)_{axis} \approx 0.24 \text{ to } 0.25 \text{ for } X/D = 75 \text{ to } 96 \quad (6.41)$$

$$(w_{rms} / \langle U \rangle)_{axis} \approx 0.24 \text{ to } 0.25 \text{ for } X/D = 75 \text{ to } 96 \quad (6.42)$$

The present simulation results concerning the gas and liquid fluctuations are comparable with this experiment. Nevertheless, for the simulated spray, self-similarity is reached later and the axial fluctuations are higher.

One can also observe that the levels are slightly lower for the liquid than for the gas. An explanation is that the fluctuations for the liquid phase report only the mean correlated fluctuating motion. The mean uncorrelated part should be added to obtain the total fluctuation. The ratio between the mean uncorrelated part and the total turbulent kinetic energy is discussed in Section 6.8.6.

Experimentally, [Doudou \(2005\)](#) also found self-similarity for the radial distribution and for the turbulence intensity. The radial distributions of the mean liquid velocity normalized by the mean liquid velocity on the axis are presented on Fig.(6.12) for different axial distances.  $y_{0.5}$  is the radial position where the velocity is equal to half the velocity on the spray axis. The first comment is that the normalized profiles are independent of the axial distance. This confirms the self-similarity. Furthermore, the results fit very well with the experimental results of [Hussein et al. \(1994\)](#) obtained in a free gas jet, arguing again in favor of same behaviour of a spray and free gas jet. The radial distributions for the gas phase are not presented here because there are similar to those of the liquid phase.

The cross correlation coefficient  $C_{uv}$  defined as :

$$C_{uv} = - \frac{\langle u'v' \rangle}{\sqrt{\langle u'^2 \rangle} \sqrt{\langle v'^2 \rangle}} \quad (6.43)$$

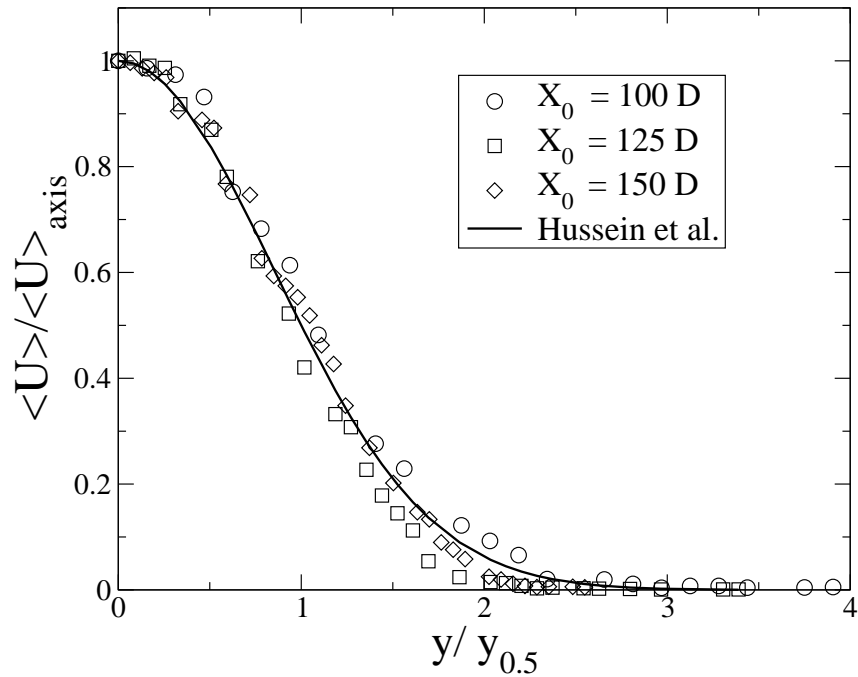


FIG. 6.12 – Self-similarity of the mean liquid axial velocity. Comparison with the experiment of Hussein et al. (1994).

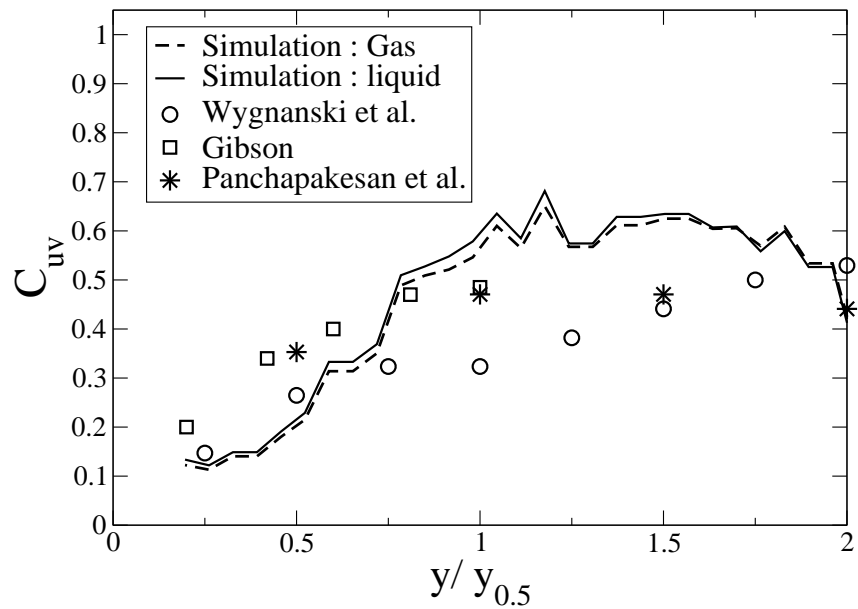


FIG. 6.13 – Coefficient of the cross correlation  $C_{uv}$  for the gas and liquid phase at  $X/D=100$ . Comparison with the experiments of Wagnanski and Fielder (1969), Gibson (1963) and Panchapakesan and Lumley (1993)

is shown in Fig. (6.13) for the gas phase and the liquid phase at  $X/D = 100$ . The results are compared to the results of Gibson (1963, Wygnansky and Fielder (1969, Panchapakesan and Lumley (1993) for a free gas jet. The first comment is that the behaviour for the gas and the liquid is the same as the experiment. Coefficients are increasing with the distance from the spray axis and seem to converge from  $y/y_{0.5} = 1$ . The levels are also comparable with the experiment even if they are slightly higher in the spray simulation.

### 6.8.5 Droplet distribution

LES is able to capture the non homogeneity of the liquid volume fraction. Fig. (6.14) shows the local liquid volume fraction strongly perturbed by the turbulence. In evaporating sprays this will lead to locally high concentration of fuel and will impact the combustion and pollutant production.

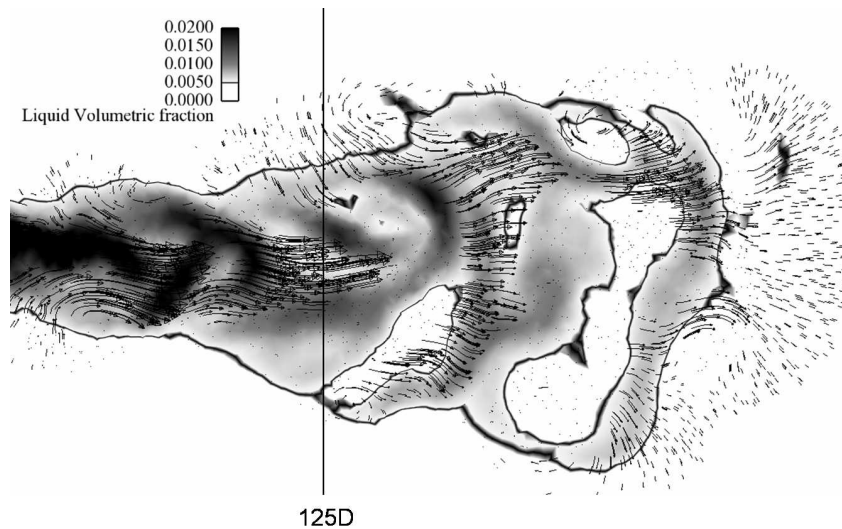


FIG. 6.14 – Cross section view. Instantaneous liquid volume fraction field and gas velocity vectors.

### 6.8.6 Uncorrelated droplet velocity

In the mesoscopic formalism, according to Fevrier et al. (2005), the particle fluctuating velocity  $u'_i$  can be decomposed into a spatially correlated contribution  $\tilde{u}'_i$  and a random and spatially uncorrelated contribution  $\delta u'_i$ . Then, the total turbulent kinetic energy of the liquid phase is the sum of the mean kinetic energy of the fluctuating part of the correlated motion  $\tilde{q}_p^2$  and the mean random uncorrelated energy  $\delta q_p^2$ . Vance et al. (2006) have proposed a correlation that permits to evaluate the ratio  $\delta q_p^2 / \tilde{q}_p^2$ . Compared to the correlation of Fevrier et al. (2005), Vance's correlation has a greater range of applicability since it applies with and without collisions and is especially improved in the near-wall region which is far from equilibrium. The correlation formulates that the fraction of the velocity variance residing in the correlated

motion is reasonably approximated by the square-root of the fluid-particle correlation coefficient :

$$\frac{\langle \widetilde{u'_{i,l}}^2 \rangle}{\langle u'_{i,l}{}^2 \rangle} \approx \sqrt{\frac{\langle u'_{i,g} u'_{i,l} \rangle^2}{\langle u'_{i,g}{}^2 \rangle \langle u'_{i,l}{}^2 \rangle}} \quad (6.44)$$

where  $i$  is the  $i$ -th component of the velocity. This expression can be extended to an energy correlation by observing that  $\langle u'_{i,l} \rangle = \langle \delta u'_{i,l} \rangle + \langle \widetilde{u'_{i,l}} \rangle$ . Then using, the inverse of Eq. (6.44), one gets :

$$\frac{\langle \delta u'_{i,l}{}^2 \rangle}{\langle \widetilde{u'_{i,l}}^2 \rangle} \approx \sqrt{\frac{\langle u'_{i,g}{}^2 \rangle \langle u'_{i,l}{}^2 \rangle}{\langle u'_{i,g} u'_{i,l} \rangle^2}} - 1 \quad (6.45)$$

Using again Eq. (6.44) to express  $\langle u'_{i,l}{}^2 \rangle$  and substituting in Eq. (6.45) gives :

$$\frac{\langle \delta u'_{i,l}{}^2 \rangle}{\langle \widetilde{u'_{i,l}}^2 \rangle} \approx \frac{\langle \widetilde{u'_{i,g}}^2 \rangle \langle u'_{i,l}{}^2 \rangle}{\langle u'_{i,g} u'_{i,l} \rangle^2} - 1 \quad (6.46)$$

According to [Fevrier et al. \(2005\)](#), the fluid-particle correlation can be simplified using the correlated part of the liquid fluctuation :

$$\langle u'_{i,g} u'_{i,l} \rangle^2 \approx \langle u'_{i,g} \widetilde{u'_{i,l}} \rangle^2 \quad (6.47)$$

Then, one gets :

$$\frac{\langle \delta u'_{i,l}{}^2 \rangle}{\langle \widetilde{u'_{i,l}}^2 \rangle} \approx \frac{\langle \widetilde{u'_{i,g}}^2 \rangle \langle u'_{i,l}{}^2 \rangle}{\underbrace{\langle u'_{i,g} \widetilde{u'_{i,l}} \rangle^2}_{Va_i}} - 1 \quad (6.48)$$

Here, it is interesting to use the correlation in terms of energy :

$$\frac{\delta q_p^2}{\widetilde{q}_p^2} \approx \frac{\sum_{i=1}^3 \langle \widetilde{u'_{i,l}}^2 \rangle Va_i}{\sum_{i=1}^3 \langle u'_{i,l}{}^2 \rangle} \quad (6.49)$$

This correlation is compared in Fig. (6.15) to the value of  $\delta q_p^2 / \widetilde{q}_p^2$  obtained in the simulation, showing that uncorrelated energy is under-estimated before  $X/D = 40$  in the simulation. This is maybe the consequence of an underestimation of the uncorrelated part on the boundary condition and maybe because the Vance's correlation has been established from a fully developed turbulent flow. Nevertheless, even if the ratio is not satisfactory near the nozzle exit, it matches very well the correlation after  $X/D = 40$  which is closer to the free jet area. The decrease of the uncorrelated energy with the distance to the nozzle exit is very well predicted.

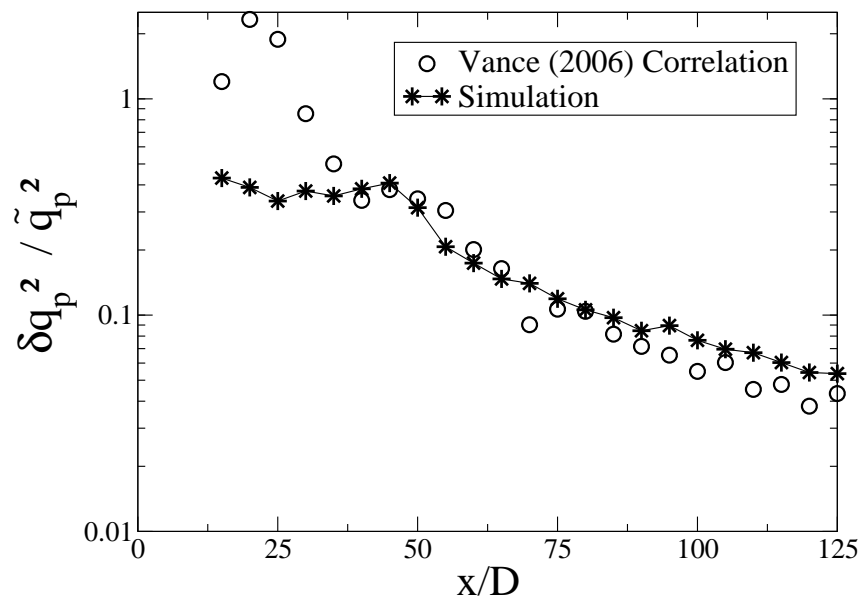


FIG. 6.15 – Partitioning of the particle fluctuating motion along axis. Comparison with the correlation of Vance et al. (2006).

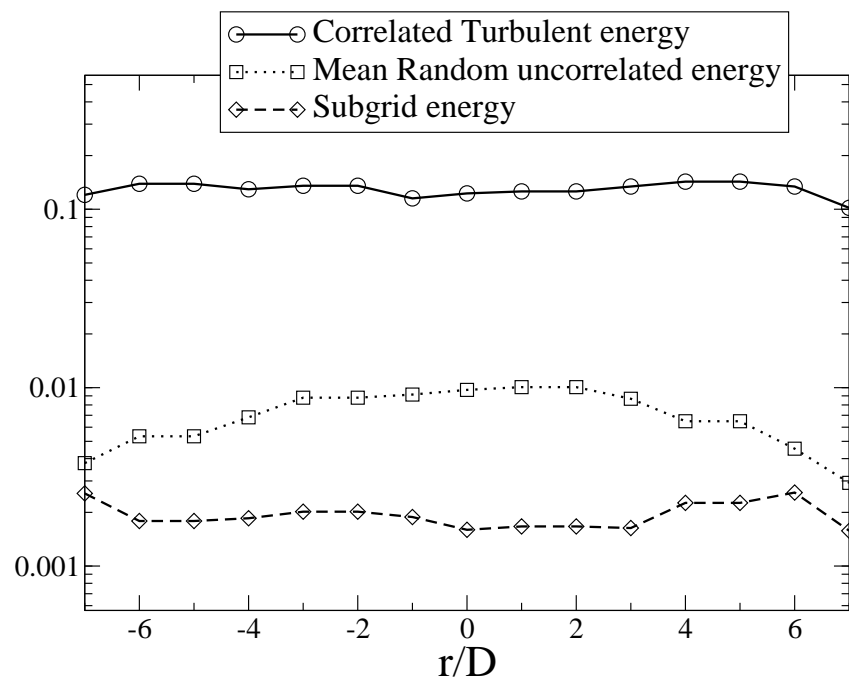


FIG. 6.16 – Decomposition of the particle fluctuating motion at  $100D$ . Radial profiles are normalised by the mean correlated energy on spray axis.

---

The decomposition of the fluctuating liquid energy into mean correlated, uncorrelated and subgrid is shown radially at  $X/D = 100$  on Fig. (6.16). The subgrid energy  $q_{SGS}$  is obtained directly from the expression of the subgrid pressure  $P_{SGS}$  defined in Eq. (6.20) because  $q_{SGS} = \frac{P_{SGS}}{\alpha_l \rho_l}$

All values are normalised by the mean correlated energy on spray axis. The mean uncorrelated energy represents about 10% of the correlated turbulent energy while the subgrid energy is about 2%. According to Pope et al. (2004), the level of subgrid energy compared to the turbulent energy ensures a good quality of the LES.

At the periphery of the spray, the uncorrelated part decreases while the subgrid part increases. Their values at  $|r/D| = 7$  are almost equal. The decrease of uncorrelated energy shows that the liquid and gas fluctuations are more correlated at the periphery than at the center. Both uncorrelated and subgrid energy are about 0.5% of the mean correlated energy.

## 6.9 Concluding remarks

The Large Eddy Simulation (LES) of Diesel Spray using an Eulerian-Eulerian approach has been conducted and compared to the experiment of Chaves et al. (2004). The two-fluid model based on the Mesoscopic Eulerian Formalism is presented with the extension to dense flows by the addition of collision effects. A sensitivity study on boundary conditions parameters has also been treated. In addition, an analysis of the spray dynamics, by comparison with experimental results from literature on turbulent gaseous jets, has been carried out. The following conclusions can be deduced from this work :

- The simulation results show a good tendency compared to the experiment in terms of decrease of axial velocity along axis. Nevertheless, the axial spray velocity is under-estimated in the simulation on the spray axis. In the simulation, the decrease of velocity is comparable to the decrease of velocity in a free turbulent gaseous jet. Our calculation does not take into account the non atomized large droplets that could appear in the experiment and contribute to the high velocity on spray axis. This is confirmed by the radial profile of axial velocity that shows a good concordance at the spray periphery but not at the center. The discrepancy will be less significant under high pressure Diesel injection where atomization is enhanced.
- The calculations are insensitive to the maximum droplet diameter injected or the gas velocity at the boundary conditions. An explanation is that the equilibrium between gas phase and liquid phase is rapidly reached. The most important parameter is the turbulence intensity at injection which highly influences the spray angle. The level of turbulence can be deduced from the turbulence properties of the gas jet.
- The LES can easily reproduce the impact of the chamber pressure on the spray angle.
- The statistical properties of the gas phase and the liquid phase show a high correlation between them. Furthermore the properties of the liquid phase look similar to those of the turbulent gaseous jet. Self-



similarity for the mean axial liquid velocity is reached at a distance of 125 nozzle diameters. The axial velocity decreases like the inverse of the distance to the nozzle exit, corresponding to a linear expansion of the jet with the distance. The self-similarity for the radial fluctuations appear later compared to the axial fluctuations. This proves the anisotropy of the rms fluctuations.

- The liquid volume fraction inside the spray shows instantaneously high local disparities. This segregation could lead to high local differences in the equivalence ratio after evaporation and can strongly impact the combustion and pollutants.



Lire  
la seconde partie  
de la thèse