

N° d'ordre : 2291

THÈSE

présentée en vue de l'obtention du titre de

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Ecole doctorale : EDyF

Spécialité : Mécanique des fluides

par M. Jean-Baptiste Mossa

EXTENSION POLYDISPERSE POUR LA DESCRIPTION EULER-EULER DES ECOULEMENTS DIPHASIQUES RÉACTIFS

Soutenue le 22 novembre 2005 devant le jury composé de :

Pr Catherine Colin
Dr Bénédicte Cuenot
Pr Marc Massot
Dr Julien Réveillon
Dr Claude Berat
Pr Roland Borghi
Dr Gérard Lavergne

CERFACS - 41 avenue Gaspard Coriolis - 31057 Toulouse Cedex
Institut National Polytechnique de Toulouse - 6 allée Emile Monso - ZAC du Palays - BP
34038 - 31029 Toulouse cedex 4

Table des matières

I	DESCRIPTION DES ECOULEMENTS FLUIDE-PARTICULES	9
1	Ecoulements diphasiques dans les turbines industrielles	11
1.1	Technologies d'injection	11
1.2	Atomisation	16
1.2.1	Causes et description du phénomène d'atomisation	16
1.2.2	Atomisation primaire	18
1.2.3	Atomisation secondaire	18
1.2.4	Caractère polydisperse des sprays	22
2	Approches de la modélisation des écoulements diphasiques	23
2.1	Dynamique d'une particule sphérique	24
2.2	Méthodes lagrangiennes	26
2.2.1	Calcul lagrangien 'direct'	26
2.2.2	Calcul lagrangien stochastique	28
2.3	Calcul semi-Lagrangien/semi-Eulérien	29
2.4	Méthodes eulériennes	31
2.4.1	Filtrage volumique	31
2.4.2	Filtrage statistique	32
2.5	Ecoulements polydisperses	33
2.6	Comparaison des différentes approches	33

3	Modélisation des écoulements diphasiques polydisperses	37
3.1	Description statistique de la phase dispersée	37
3.1.1	Formalisme mésoscopique	37
3.1.2	Définition des opérateurs de moyenne	38
3.1.3	Equation générale d'Enskog	42
3.2	Equations bilan de la phase dispersée	48
3.2.1	Densité de particules	48
3.2.2	Fraction massique	49
3.2.3	Densité de surface	50
3.2.4	Quantité de mouvement	51
3.2.5	Energie quasi-brownienne (E_{QB})	52
3.2.6	Température et enthalpie	54
3.3	Résumé des équations de la phase dispersée	55
3.4	Résumé des hypothèses sur la phase dispersée	56
3.5	Equations bilan de la phase continue	57
3.5.1	Fitrage LES	57
3.5.2	Fluide newtonien et gaz parfait	58
3.5.3	Equation de conservation de la masse	59
3.5.4	Equation de conservation de la quantité de mouvement	60
3.5.5	Equation de conservation des espèces	60
3.5.6	Equation de conservation de l'énergie	61
3.5.7	Les équations filtrées	61
3.5.8	Les modèles de sous-maille	62
4	Fermetures	65
4.1	Pdf présumées	66
4.2	Calcul analytique des moments	73

TABLE DES MATIÈRES

4.3	Détermination des paramètres	76
4.3.1	Détermination de d_{00} et $\hat{\sigma}$	76
4.3.2	Détermination de \vec{u}_τ	77
4.3.3	Détermination de θ_Γ et E_Γ	82
4.4	Flux décorrélés	82
4.4.1	Flux décorrélé moyen de densité de particules	84
4.4.2	Flux décorrélé moyen de densité de surface	86
4.4.3	Flux décorrélé moyen de QDM	87
4.4.4	Flux décorrélé moyen d' E_{QB} et diffusion quasi-brownienne	88
4.4.5	Efforts extérieurs	89
4.4.6	Evaporation	92
4.5	Retour à l'état monodisperse	94
4.6	A propos de l'effet de la turbulence du fluide porteur sur la phase dispersée	99
 II METHODES NUMERIQUES ET SIMULATIONS		101
 5 Code de calcul AVBP_TPF		105
5.1	Présentation	105
5.2	Schémas numériques	105
5.3	Conditions aux limites	107
5.3.1	Conditions aux limites sur la phase dispersée	107
5.3.2	Conditions aux limites sur la phase continue	107
5.3.3	Simulation d'injection de turbulence	108
5.4	Reconstitution de grandeurs et transport	110
5.5	Opérateurs de traitement des fronts et conséquences en polydisperse	111
 6 Cas de validation théorique : spray liquide en soufflage transverse		113

TABLE DES MATIÈRES

6.1	Solution analytique	113
6.2	Configuration	116
6.3	Résultats	116
7	Comparaison calcul/expérience : configuration Sommerfeld-Qiu	127
7.1	Configuration	128
7.2	Résultats	130
7.2.1	Cas A	130
7.2.2	Cas B	148
8	Application à un cas industriel : VESTA	153
8.1	Configuration	153
8.2	Résultats	157
III	Conclusions	165
9	Bilan du modèle polydisperse et axes de développement	167
9.1	Bilan du modèle polydisperse	167
9.1.1	Apport du modèle	167
9.1.2	Point à traiter avec précautions en polydisperse	168
9.1.3	Termes prépondérants	168
9.1.4	Protocole d'estimation du paramètre τ_{conv}	169
9.2	Perspectives	172

Introduction

La première méthode de synthèse industrielle de carburant a été découverte par Friedrich Bergius en 1921. A l'origine, il s'agissait d'une simple essence organique. Aujourd'hui, de nombreux dérivés, raffinés et transformés, sont développés pour répondre à des besoins toujours plus spécifiques en terme de performance et de coût. Les carburants liquides sont maintenant la première source de production d'énergie tant au niveau industriel que domestique. Dans une turbine d'avion ou un moteur à piston de cargo, dans un chauffage au fuel ou une lampe à pétrole, le même phénomène, la même physique intrinsèque : un écoulement diphasique réactif et un carburant liquide.

Ce choix est dicté par la facilité de stockage de l'énergie sous forme chimique dans un combustible liquide, qui dépasse la densité énergétique de la plupart des autres moyens de stockage chimique. Cependant, il est maintenant avéré que l'utilisation massive des énergies fossiles change l'environnement. Les émissions d'oxydes de carbone ou d'azote sont non seulement potentiellement dangereuses pour la santé mais leur accumulation dans l'atmosphère change également l'évolution du climat au travers de processus complexes. La pollution atmosphérique est devenue une vraie préoccupation de santé publique au niveau local et un facteur de changement climatique au niveau global dont la prise de conscience a entraîné un balbutiement de gestion planétaire des émissions de dioxyde de carbone.

Face à cette situation, les pouvoirs publics ont engagé des études pour permettre de prédire les niveaux de concentration de polluants dans les zones urbaines et minimiser l'exposition de la population au travers de la mise en place de réglementations nationales ou européennes strictes sur l'émission de polluants. Ces réglementations s'appuient sur deux types de contraintes, soit elles réduisent l'activité industrielle et les habitudes de consommation énergétiques des citoyens, ce qui produit également des répercussions sur l'activité économique, soit elles imposent de réduire les émissions au travers du développement de technologies moins polluantes. Certains états soucieux de leur croissance préfèrent ne considérer que la deuxième possibilité au détriment des facteurs climatiques mais, dans tous les cas, une prise de conscience forte de l'ensemble des acteurs a permis d'impulser une dynamique de développement technologique qui passe par la mise en place de nouveaux outils d'étude, plus performants et plus précis.

La communauté des turbines à gaz, dont les principales applications sont les réacteurs aéronautiques et la production d'électricité, est particulièrement concernée. Pour envisager de contrôler

les niveaux de polluants, il faut réviser en grande partie la conception des chambres de combustion, en se basant sur une connaissance approfondie de la physique de la combustion turbulente. Il y a là un intérêt considérable pour les industriels car, si la compréhension des phénomènes de combustion conditionne bien sur la formation de polluants, c'est aussi et avant tout la clé des avancées technologiques en matière d'amélioration de puissance, de gains de performance et de réduction de consommation. Dans un secteur très concurrentiel comme l'est le secteur aéronautique, il y a là un double avantage qui profite également aux actions de recherche scientifique dans ce domaine, avec des retombées possibles sur de nombreux domaines connexes (moteurs automobiles, fours à verre, réacteurs à charbon...).

L'étude par mesure expérimentale est la première façon d'obtenir cette connaissance approfondie de la phénoménologie de la combustion turbulente. Cependant, la zone de mesure est exposée à des températures élevée et toutes les grandeurs n'y sont pas mesurables, même si les techniques à base de balayage laser permettent d'obtenir de nombreux résultats.

Il existe alors une autre façon de dégager les éléments pertinents d'un écoulement : la simulation numérique. Cette méthode offre une complémentarité très intéressante, voire parfois une alternative, pour la compréhension des phénomènes complexes. En validant les hypothèses des modèles par rapport à l'expérience, cet outil a déjà fait la preuve de son efficacité et de son potentiel à décrire la physique des écoulements réactifs. Cependant la simulation numérique n'a pas encore atteint un caractère prédictif dans plusieurs domaines et de nouveaux développements sont encore nécessaires.

Par ailleurs, pour obtenir un maximum d'énergie thermique, la plupart des applications évoquées précédemment utilisent un régime de combustion turbulent et la formation des polluants en est une conséquence. Il est donc nécessaire de développer des outils toujours plus précis pour décrire ce type d'écoulement réactif. Si les carburants sont liquides, il faut naturellement y ajouter la complexité des écoulements diphasiques.

L'étude des écoulements turbulents a beaucoup évolué dans les trente dernières années grâce à l'utilisation des calculateurs informatiques. D'abord centrée sur les turbines aéronautiques, la recherche en combustion turbulente s'est ensuite développée sur les moteurs à piston et les turbines à gaz. Concernant les écoulements diphasiques, de nombreux travaux ont été menés pour les applications de l'industrie chimique (lits fluidisés). Si ces applications peuvent avoir un intérêt direct pour le secteur énergétique (combustion de déchets ou de charbons de mauvaise qualité en lits fluidisés dans les centrales thermiques), le contexte des turbines nécessite des études spécifiques. Enfin, il existe peu d'études sur la combustion turbulente diphasique, qui implique deux domaines présentant déjà séparément une grande complexité. D'où l'intérêt de la simulation numérique pour étudier ces phénomènes précisément.

Cependant, avec la puissance des calculateurs actuels, il est impossible de simuler l'écoulement proche autour des quelques millions de gouttelettes qui apparaissent, par exemple, dans un injecteur de turbine à gaz. Il est donc toujours nécessaire de modéliser la zone proche de la goutte pour que l'écoulement plus lointain puisse être simulé à des coûts raisonnables. Cette restriction n'empêche cependant pas d'étendre le spectre des phénomènes simulés.

Dans cette optique, il existe un point essentiel à prendre en compte. Les systèmes d'injection

actuels ne peuvent générer une atomisation totalement monodisperse et, si le phénomène peut être amélioré, plusieurs éléments physiques laisse supposer qu'il ne puisse disparaître totalement. Les gouttes obtenues ne sont pas toutes de même diamètre et se retrouvent donc dispersées de façon différente selon leur taille. Il en résulte, après évaporation, des zones moins riches que celles initialement prévues pour permettre l'allumage, ainsi que la présence de faible quantité de carburant gazeux dans des zones où cette présence n'est ni nécessaire ni souhaitée. Afin de comprendre ces phénomènes et de pouvoir en contrôler les effets pour les restreindre ou les utiliser, une extension polydisperse des modèles diphasiques existants est nécessaire.

L'étude de la combustion turbulente diphasique polydisperse implique de traiter avec attention trois points :

1. Si l'on veut pouvoir capter les interactions spatio-temporelles de la flamme avec l'écoulement (dynamiques et acoustiques), il convient d'utiliser une méthode descriptive de la turbulence suffisamment précise et de ne pas négliger la compressibilité des gaz.
2. Ensuite, afin de limiter les problèmes numériques, la présence d'une flamme impose d'avoir des champs de fraction massique de fuel gazeux non seulement continus mais également à dérivée continue. Cela entraîne d'avoir un champ de fraction massique de carburant liquide possédant les mêmes propriétés puisque les deux phénomènes sont complètement couplés au travers de l'évaporation.
3. Enfin, la robustesse et le coût en temps de calcul détermine un niveau de compromis à trouver pour développer un modèle respectant les points énoncés.

Pour les trois raisons évoquées ci-dessus, il semble que les méthodes Reynolds Average Navier-Stokes (RANS) ne soient pas assez précises, qu'une formulation lagrangienne nécessiterait trop de particules pour générer un champ de fraction massique de fuel suffisamment continu et enfin qu'une méthode eulérienne à classes de particules serait beaucoup trop coûteuses. Par ailleurs, il semble, au regard des méthodes existantes, que le développement d'une description Euler-Euler polydisperse en Simulation de Grandes Echelles (SGE) basée sur le transport d'équation de moments puisse représenter un apport scientifique. Ce travail a donc pour but le développement d'une méthode inexplorée jusqu'alors en cherchant à capturer un maximum d'effets physiques polydispersés tout en préservant les performances de calcul.

- La première partie propose une approche globale des écoulements diphasiques tant au niveau technologique que théorique. Le premier chapitre présente un panorama des techniques d'injection couramment utilisées dans les turbines à gaz et une analyse des éléments physiques engendrant le phénomène d'atomisation. Ensuite, un tableau des diverses descriptions existantes des écoulements diphasiques est brossé et une comparaison de leurs avantages et inconvénients respectifs est proposée. Enfin, la description mathématique retenue pour le système diphasique est présentée et un modèle d'extension spécifique à cette description est construit.

- La seconde partie explicite les méthodes numériques et le code de calcul utilisés et propose trois configurations d'étude et de validation du modèle proposé.
- Enfin, la troisième et dernière partie effectue une synthèse des apports de ce travail et donne quelques pistes pour poursuivre le développement du modèle polydisperse.

Liste des symboles

Abbréviations

- COUPL Cerfacs and Oxford University Parallel Library
- DNS Direct Numerical Simulation 'Simulation Numérique directe'
- EQB Energie Quasi-Brownienne
- LES Large Eddy Simulation 'Simulation des Grandes Echelles'
- NSCBC Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions 'Conditions Limites Caractéristiques de type Navier-Stokes' , page 107
- FDP Fonction de Densité de Probabilité
- PDF Probability Density Function 'Fonction de Densité de Probabilité'
- RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes 'Equations de Navier-Stokes moyennées par moyenne de Reynolds'
- SGE Simulation des Grandes Echelles
- SGS Sub Grid Scale 'Echelles Sous Maille', page 63
- SND Simulation Numérique directe
- WALE Wall Adaptating Local Eddy-viscosity 'Viscosité d'Echelle Locale s'Adaptant à la Paroi', page 64

Symboles grecs

- α_2 fraction volumique des particules, page 39
- β_p diamètre d'une particule probable, page 38
- Γ_1 variation de masse de l'espèce *evap* par évaporation, page 59
- Γ_2 variation moyenne de masse par évaporation ou condensation, page 49
- Γ_h variation d'enthalpie due aux variations de masse des particules, page 55
- Γ_{QB} variation d'énergie cinétique due aux variations de masse des particules, page 54

Γ_s	variation moyenne d'interface par évaporation ou condensation , page 50
Γ_u	variation de QDM due aux variations de masse des particules (évaporation...) , page 51
κ_{QB}	diffusion quasi-brownienne, page 89
μ_1	viscosité dynamique, page 58
μ_{QB}	viscosité dynamique quasi-brownienne, page 87
ν_1	viscosité cinétique du fluide porteur, page 24
ν_{QB}	viscosité cinétique quasi-brownienne, page 87
Π_2	échanges d'enthalpie avec la phase continue, page 55
ρ_1	masse volumique de la phase continue, page 58
ρ_2	masse volumique d'une particule, page 39
Σ_2	densité de surface mésoscopique, page 50
σ_2	surface d'une particule, page 50
$\hat{\sigma}$	paramètre sans dimension d'écart à d_{00} , page 70
$\tau_{1,ij}$	tenseur des contraintes de la phase continue, page 58
$\tau_{2,ij}$	tenseur des contraintes visqueuses, page 87
τ_{conv}	temps caractéristique de la convection des particules, page 25
τ_{drag}	temps de relaxation des particules, page 25
θ_2''	température décorrélée d'une particule, page 42
θ_2	température d'une particule, page 38
θ_Γ	température conditionnée par le diamètre, page 72
ζ_p	température d'une particule probable, page 38

Fonctions, opérateurs et indices

$\langle . \rangle_2$	moyenne massique, page 39
$\{.\}_2$	moyenne statistique, page 39
"	symbole indiquant une quantité décorrélée, page 41
1	indice caractérisant la phase continue (gaz ou liquide), page 16
2	indice caractérisant la phase dispersée, page 16
k_{evap}	indice correspondant à l'espèce constitutive des particules, susceptible de s'évaporer
f_2	FDP des particules, page 38

G_θ	loi de probabilité gaussienne, page 72
G_u	loi de probabilité gaussienne, page 71
i, j, k	indices spatiaux
K_0	fonction adimensionnelle, page 85
K_1	fonction adimensionnelle, page 90
K_2	fonction adimensionnelle, page 86
K_3	fonction adimensionnelle, page 80
N_d	loi de probabilité log-normale, page 69
p	indice caractérisant une quantité particulière, page 24
\mathbb{T}	opérateur de flux décorrélé, page 47

Symboles romains

B	nombre de transfert de Spalding, page 92
C	terme source d'interaction des particules entre elles, page 44
\vec{c}_p	vitesse d'une particule probable, page 38
C_p	chaleur spécifique à pression constante, page 59
C_v	chaleur spécifique à volume constant, page 59
c_1	coefficient numérique, page 81
c_2	coefficient numérique, page 81
C_d	coefficients de traînée d'une particule, page 24
C_M	coefficients de masse ajoutée d'une particule, page 24
D_2	coefficient de diffusion moléculaire, page 92
d_2	diamètre d'une particule, page 38
d_{00}	diamètre caractéristique du nuage de particules, page 70
d_{St}	diamètre tel que $St(d_{St}) = 1$, page 79
E_Γ	paramètre de dispersion de température, page 72
E_τ	paramètre assimilable à une énergie cinétique, page 71
E_{QB}	Energie Quasi-Brownienne, page 52
e_t	énergie totale du gaz, page 61
F	forces extérieures appliquées sur une particule, page 51

F_d	terme source de traînée, page 89
\mathcal{H}_f	réalisation du champ gazeux, page 38
h_2''	enthalpie décorrélée d'une particule, page 42
H_2	enthalpie mésoscopique massique, page 42
h_2	enthalpie d'une particule, page 42
n_2	densité de particules, page 39
On	nombre d'Ohnesorge, page 16
p_1	coefficient numérique, page 81
p_2	coefficient numérique, page 81
p_{QB}	pression quasi-brownienne, page 87
\bar{r}	constante du mélange, page 59
p_1	pression de la phase continue, page 58
Re_p	Reynolds particulaire, page 25
S_γ	moment de diamètre d'ordre γ , page 74
St	nombre de Stokes, page 25
T_2	température mésoscopique massique, page 42
T_1	température thermodynamique de la phase continue, page 58
\vec{u}_∞	vitesse des particules à fort St , page 79
\vec{u}_2''	vitesse décorrélée d'une particule, page 42
\vec{U}_2	vitesse mésoscopique massique, page 42
\vec{u}_2	vitesse d'une particule, page 38
\vec{u}_1	vitesse de la phase continue, page 58
\vec{u}_τ	vitesse conditionnée par le diamètre, page 71
\bar{W}	masse moléculaire moyenne du mélange, page 59
W_k	masse moléculaire l'espèce k , page 59
We	nombre de Weber, page 16
Y_k	fraction massique gazeuse l'espèce k , page 59

Première partie

**DESCRIPTION DES
ÉCOULEMENTS
FLUIDE-PARTICULES**

Chapitre 1

Écoulements diphasiques dans les turbines industrielles

1.1 Technologies d'injection

La plupart des turbines à gaz actuelles utilisent des carburants fossiles sous forme liquide mais alimentent la flamme par un carburant gazeux.

L'injecteur qui a pour objet d'apporter le carburant liquide dans la chambre doit également préparer au mieux la transition entre la phase liquide et la phase gazeuse.

Dans cette optique, il existe deux approches. La première consiste à fragmenter le carburant liquide pour faciliter son évaporation au sein des gaz chauds de la chambre, la seconde propose d'évaporer directement le carburant avant de l'injecter dans la chambre. Ces deux approches définissent naturellement deux types d'injecteurs :

- les vaporisateurs
- les pulvérisateurs (ou atomiseurs)

Le premier type d'injecteurs classiques est constitué des vaporisateurs :

- Les vaporisateurs à canne (Fig. 1.1 a) :

Le principe de ce système est le suivant : plutôt que de chercher à fractionner le fuel en gouttelettes puis de chercher à les évaporer, pourquoi ne pas l'évaporer directement ?

Le composant nécessaire à cette opération, un tube en 'T', est simple et efficace et présente un coût plus faible que celui des atomiseurs. Le diamètre important du tube limite l'encrassement et un ajout d'air dans la canne permet de contrôler partiellement la richesse.

Le problème principal de ce système est l'amorçage. S'il n'y a pas assez de chaleur pour une évaporation totale, le fuel liquide va s'écouler le long du 'T' et être atomisé par interaction avec le gaz de façon non contrôlée au niveau de l'embouchure. Comme le fuel sert égale-

ment de refroidissant à la canne, cela pose problème en cas de coupure du débit liquide ou de forte accélération, car soit la canne va subir un échauffement important soit le liquide n'aura pas le temps d'être complètement évaporé. Enfin, comme l'injecteur est au milieu de la chambre, il peut se poser des problèmes de durée de vie.

Le deuxième type d'injecteurs se compose des pulvérisateurs qui sont les systèmes les plus employés dans la pratique. Ils peuvent être classés en sous-catégories en fonction de leur technologie spécifique :

- Les atomiseurs pressurisés (Fig. 1.1 b) :

Appelés aussi pulvérisateurs hydrauliques, ce sont les injecteurs les plus anciens et les plus simples. Le liquide est mis sous pression (quelques bars à plusieurs dizaine de bars) dans un réservoir puis passe au travers d'une buse étroite. L'interaction du liquide avec les parois génère des instabilités qui se propagent dans le jet en atomisation (*cf.* paragraphe 1.2).

L'avantage principal de ce système est sa simplicité qui n'empêche pas une bonne atomisation (diamètre des gouttes homogène rapidement avec une faible granulométrie finale) . De plus, l'utilisation d'écoulements tournants ('swirled flows') permet d'obtenir, si besoin est, de plus amples angles de spray en sortie de buse.

L'inconvénient majeur de ce type d'injecteur est le fort différentiel de pression nécessaire au passage du débit de carburant. En effet, le différentiel varie comme le carré du débit souhaité et limite donc rapidement l'injection pressurisée. Un autre inconvénient connu (et quasiment commun à tous les pulvérisateurs) est le phénomène de 'crachotage' au moment de la montée en régime : le différentiel de pression est trop faible pour donner une vitesse suffisante au dard liquide qui se fragmente de façon irrégulière en gouttes de gros diamètre.

- Les atomiseurs pressurisés assistés (Fig. 1.1 c) :

Evolution naturelle du modèle précédent dans l'optique de vaincre la limitation de pression et parfois dénommés pulvérisateurs pneumatiques, ces injecteurs proposent de dynamiser l'écoulement liquide par un écoulement adjoint d'air, soit par mélange direct avant la buse, soit en écoulement cocourant après la buse.

Le gros avantage est de pouvoir atteindre des régimes de débits bien plus élevés sans nécessiter un gros compresseur mais aussi de pouvoir utiliser des carburants plus visqueux.

Un inconvénient est le confinement possible produit par l'écoulement adjoint qui limite l'angle du spray à environ 60°

- Les atomiseurs 'airblast' (Fig. 1.1 d) :

Parmi les injecteurs assistés, un modèle particulier a connu une répanion plus importante, l'atomiseur 'airblast', ce qui peut se traduire par atomiseur 'aérosoufflé' et qui exprime le fait que l'arrachement en fragments liquides provient d'une interaction avec l'air entraînant et non plus avec les bords de la buse. C'est le différentiel de vitesse au niveau de l'interface air/liquide qui au travers de la traînée amplifie les perturbations et accélère l'arrachement.

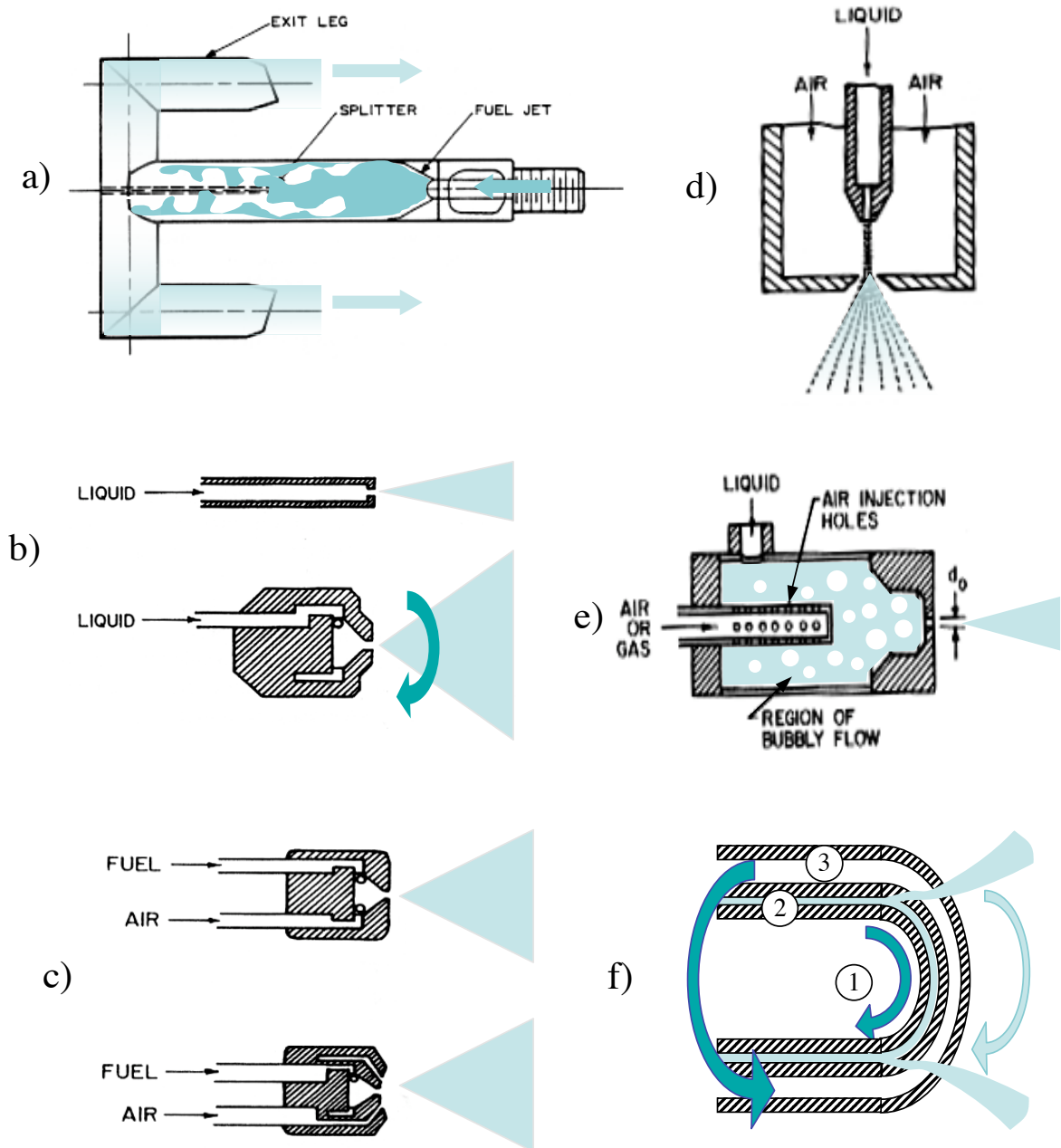


FIG. 1.1 – Injecteurs (d'après A. Lefebvre [31])

a) vaporisateur b) atomiseur pressurisé c) atomiseur pressurisé assisté

d) atomiseur 'airblast' e) atomiseur effervescent

f) atomiseur à film liquide (1 : écoulement gazeux rotatif interne, 2 : nappe liquide en rotation, 3 : écoulement gazeux rotatif externe)

Ce système permet d'obtenir des pulvérisations très fines et nécessite moins de vitesse et de débit d'air que les atomiseurs assistés classiques. Les gouttes sont également convectées plus facilement en aval.

Par contre, la présence d'un écoulement d'air engendre un couplage avec le reste de la chambre et il est fait mention d'instabilités possibles à haute pression [31] .

- Les atomiseurs effervescents (Fig. 1.1 e) :

Parmi les atomiseurs les plus récents figurent les atomiseurs effervescents qui ont pour principe de chercher à pulvériser un mélange d'air et de gaz. Ce système simple, qui permet une 'aération' du spray, produit une très bonne atomisation même à faible pression et limite l'encrassement. En revanche, le spray obtenu comporte une large distribution de diamètres compris dans un angle assez faible et nécessite une source secondaire de compression pour produire les bulles, ce qui peut être limitant en utilisation à haute pression.

- Les atomiseurs à film liquide en paroi (Fig. 1.1 f) :

Ces injecteurs sont ceux qui mettent en jeu les écoulements les plus complexes. Leur principe de fonctionnement repose sur l'atomisation d'une nappe liquide par fort cisaillement avec l'air. Dans ce but, la nappe liquide (2), elle-même tournante (swirled), est maintenue entre deux écoulements gazeux tournants contra-rotatifs (1 et 3) qui produisent un très fort différentiel de vitesse entre la face interne et la face externe de la nappe. Le nombre élevé de degrés de liberté (sens et vitesse de rotation des trois écoulements tournants) permet d'obtenir une large gamme de régimes d'atomisation. La meilleure atomisation est obtenue lorsque les écoulements gazeux interne et liquide sont co-rotatifs et que l'écoulement gazeux externe est contra-rotatif par rapport aux deux précédents.

L'inconvénient de ce système est comme pour beaucoup d'autres atomiseurs, la faible performance lors de la montée en régime où l'établissement de l'arrachage de la nappe liquide peut générer des gouttes de fort diamètre.

- Les atomiseurs rotatifs (Fig. 1.2) :

Dans les turbines à gaz, l'arbre autour duquel sont mis en rotation le compresseur et la turbine est un élément qui est parfois utilisé pour produire une atomisation par centrifugation. L'un des plus connus est sans doute le système 'slinger' (fronde) développé par Turboméca. Le système est simple, peu coûteux et produit une bonne atomisation même à faible rotation. Le mouvement continu atténue le dépôt de suie et donc l'encrassement.

Par contre, l'atomisation dépend fortement de l'usinage des trous et de la vitesse de rotation de l'arbre, ce qui engendre des difficultés d'uniformisation du spray. De plus, pour des raisons d'agencement des pièces, le fluide doit parcourir une longueur plus importante que dans un atomiseur fixe ce qui augmente d'autant le temps de réponse au démarrage et pose problème notamment pour le réallumage en altitude. Enfin, le refroidissement du tube est également un élément critique si on ne veut pas vaporiser le fuel dans l'arbre.

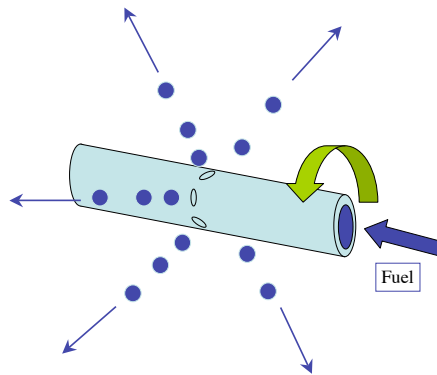


FIG. 1.2 – Atomiseur rotatif

Les atomiseurs rotatifs sont également très répandus dans le domaine agricole pour l'épandage d'engrais ou de désherbants par exemple. Les gouttes obtenues sont généralement polydisperses (Fig. 1.3 a). Un atomiseur breveté en 2004 [79] met en avant l'utilisation d'un système piézoélectrique pour générer des instabilités contrôlées au niveau des filaments liquides qui s'échappent des trous. Ce procédé permet d'obtenir une atomisation quasi-monodisperse mais surtout homogène (Fig. 1.3 b) ce qui maximise l'efficacité des produits épandus.

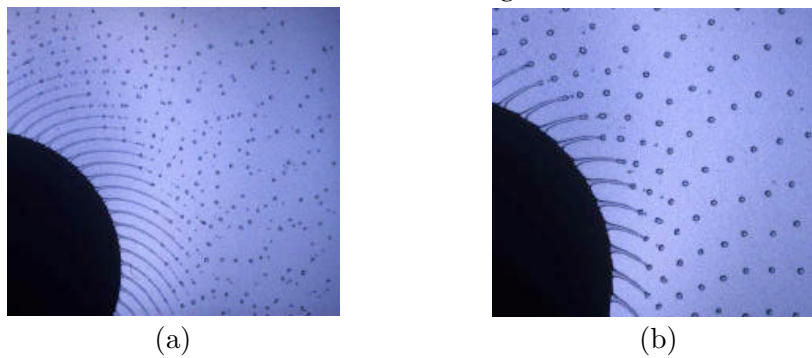


FIG. 1.3 – Atomiseur rotatif piézoélectrique
 (a) sans contrôle acoustique (b) avec contrôle acoustique

1.2 Atomisation

1.2.1 Causes et description du phénomène d'atomisation

L'atomisation est un phénomène transitoire qui fait passer un liquide d'un état continu à un état dispersé.

Ce passage est une réorganisation du fluide vers un état plus stable dans lequel les perturbations extérieures à l'origine de l'atomisation ne génèrent plus d'instabilités amplifiées.

Les premières études de 'veines liquides' que l'on appellerait aujourd'hui 'jet liquides' datent de 1833 et sont dues à Savart [63]. Il remarque la transformation du jet cylindrique en gouttes à une certaine distance de l'orifice, distance d'autant plus courte que les perturbations acoustiques de son violon vibrent à l'unisson avec la fréquence propre du phénomène.

L'origine physique de cette instabilité capillaire réside dans la minimisation de l'énergie de surface (travail de la tension de surface intégrée sur l'aire du volume fermé). En effet, pour un volume de fluide compact donné, la forme qui minimise la surface est la sphère et non le cylindre initialement imposé par le jet, d'où la transition du jet en gouttes. Cet argument énergétique est dû au physicien belge Plateau qui le propose en 1873 [50].

L'étude plus fine de l'instabilité et de sa propagation sera faite par Lord Rayleigh en 1879 [56]. Il expose qu'il existe une longueur d'onde optimale $\lambda_{opt} = 4.51D$ avec D diamètre du tube, qui, lorsqu'elle correspond aux perturbations les plus rapidement amplifiées, conduit à la formation de gouttes dont le diamètre vaut $1.89D$.

En 1931, Weber[76] définit un nombre caractéristique du phénomène, We , défini de la façon suivante :

$$We = \frac{\rho_1 V_r^2 D}{\sigma} \quad (1.1)$$

avec ρ_1 densité de l'air, V_r différentiel de vitesse entre l'air et le jet et σ tension de surface du liquide injecté. L'indice $_1$ désigne la phase gazeuse.

Ce nombre compare les forces aérodynamiques d'arrachement ($\rho_1 V_r^2$) aux efforts surfaciques (σ/D). Il est souvent utilisé en modélisation pour définir une valeur seuil au delà de laquelle l'atomisation se produit. Weber généralise également la théorie de Rayleigh pour prendre en compte les effets de la viscosité du liquide dans l'expression de la longueur d'onde optimale :

$$\lambda_{opt} = 4.44D(1 + 3On)^{0.5} \quad (1.2)$$

avec On , nombre d'Ohnesorge, défini selon

$$On = \frac{\mu_2}{\sqrt{\rho_2 \sigma D}} \quad (1.3)$$

avec μ_2 viscosité dynamique et ρ_2 masse volumique du liquide. L'indice $_2$ caractérise la phase liquide. On quantifie le rapport entre les effets visqueux au sein du liquide et la tension surfacique.

Ces premières études ont permis de formaliser la compréhension et la description de l'instabilité intrinsèque d'un écoulement issu d'une conduite cylindrique, instabilité à laquelle est aujourd'hui donné le nom d'instabilité de Savart-Plateau-Rayleigh.

C'est précisément cette instabilité que l'on trouve au passage de la buse d'un atomiseur et qui initie le phénomène d'atomisation.

L'atomisation peut être décrite de façon générique en trois phases :

1. Des efforts extérieurs (interactions fluide-structure, traînée, acoustique...) engendrent des instabilités dans un écoulement diphasique laminaire.
2. Ces instabilités sont amplifiées et la minimisation de l'énergie de surface engendre les premières ruptures (d'une nappe en filaments puis en gouttelettes ou d'un filament directement en gouttelettes *cf* Fig. 1.4 partie gauche). Ce processus est appelé atomisation primaire .
3. Les gouttes les plus volumineuses issues de l'atomisation primaire peuvent être instables si leur We est assez grand (de l'ordre de $8/C_d$ avec C_d coefficient de traînée de la goutte) et ainsi créer de nouvelles gouttes plus petites (Fig. 1.4 partie droite). Ce processus est appelé atomisation secondaire.

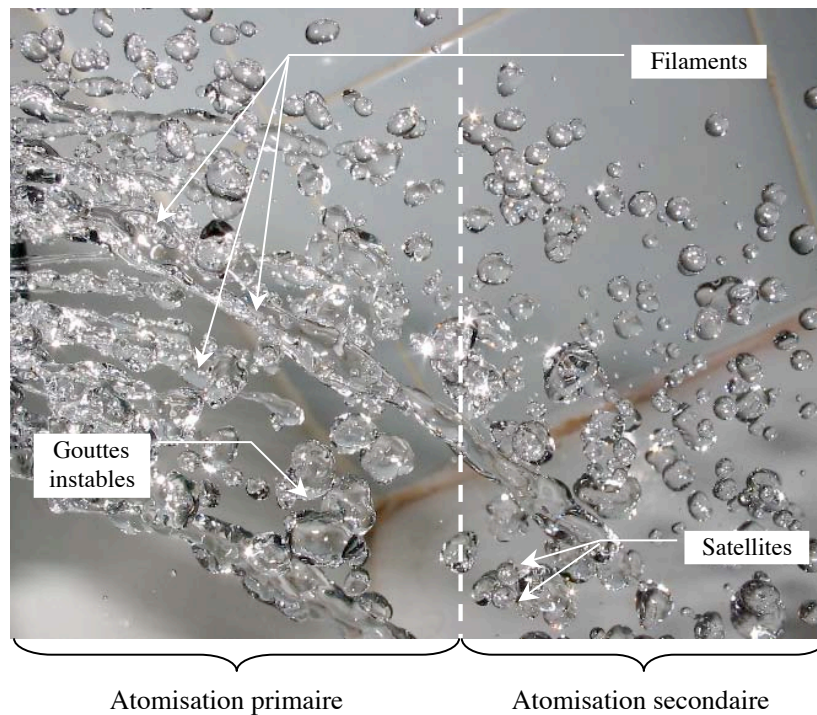


FIG. 1.4 – Illustration des atomisations primaire et secondaire
Crédit : photo personnelle

Le processus d'atomisation est un phénomène diphasique chaotique (un écart très faible des

conditions initiales conduit à des résultats très différents) qui découle d'une succession de petites perturbations plus ou moins amplifiées. En ce sens, on peut le rapprocher de la transition à la turbulence dans un écoulement monophasique et cela explique peut-être la difficulté de sa modélisation.

1.2.2 Atomisation primaire

Le processus d'atomisation primaire est en quelques sorte une 'introduction' dans laquelle les instabilités de l'écoulement de grande longueur d'onde produisent de nombreuses structures cohérentes de grande échelle (de l'ordre du diamètre du jet). Une photographie de Marmottant [36] permet de visualiser la transition avec l'apparition des premiers filaments au bout desquels se forment déjà les premières gouttelettes (Fig. 1.5). On remarque des symétries encore nombreuses, puisqu'on peut quasiment trouver huit plans de symétrie dans cet écoulement, et la structure est majoritairement compacte.



FIG. 1.5 – Atomisation primaire, Marmottant [36]

1.2.3 Atomisation secondaire

Lors de l'atomisation secondaire, au contraire de l'exemple précédent, c'est l'aspect dispersé qui domine. Les instabilités sont cette fois dues aux interactions avec le gaz (turbulent ou non) et couvrent de nombreuses longueurs d'onde. Dès $We \sim 1$, on peut noter l'apparition de déformations importantes si l'écoulement gazeux est turbulent.

Les illustrations 1.6 à 1.11 sont tirées de Samenfink [62].

- Dans le cas laminaire idéal, deux gouttes se séparent de façon symétrique en produisant au centre un satellite. Mais ce satellite produit également un autre satellite plus petit avec chacune des gouttes mères. Et chaque satellite génère à son tour deux autres satellites de plus en plus petits, et ainsi de suite (Fig. 1.6). Le phénomène s'arrête rapidement, les effets

de tension de surface devenant de plus en plus importants devant les effets inertiels lorsque la taille décroît (1.1).

Dès que le gaz est un tant soit peu turbulent, ce type d'atomisation laisse la place à des phénomènes beaucoup moins simples et surtout non-binaires.

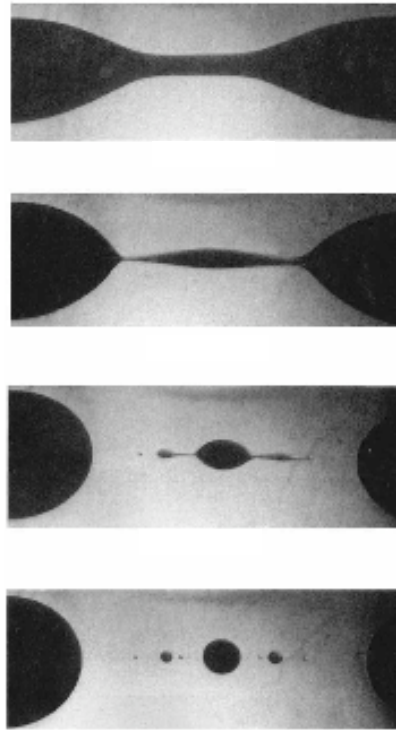


FIG. 1.6 – Atomisation simple, Samenfink [62]

- Pour $We \sim 10$, la goutte est soufflée comme un ballon de baudruche autour d'une structure toroïdale caractéristique (Fig. 1.7). Puis, la pellicule liquide devient trop mince et se rompt très rapidement en de nombreux filaments qui dégènerent à leur tour en gouttelettes de tailles variées.
- Pour $We \sim 20$, la goutte est également soufflée mais produit plusieurs 'demi-ballons' de taille diverses autour d'une colonne liquide centrale qui donne au tout une forme de parapluie (Fig. 1.8). Les gouttes provenant du film sont plus petites que pour le cas précédent mais les gouttes issues de la colonne centrale sont plus volumineuses.

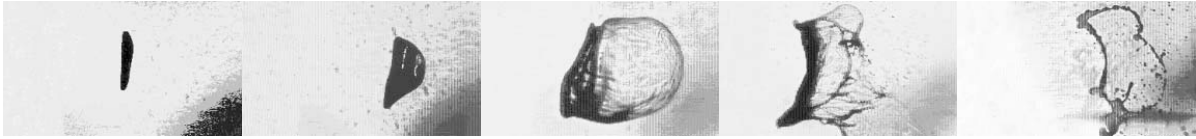


FIG. 1.7 – Atomisation en 'sac', Samenfink [62]

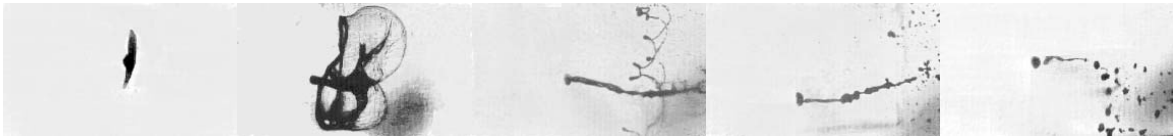


FIG. 1.8 – Atomisation multimode, Samenfink [62]

- Pour $We \gtrsim 50$, il n'y a plus de structure en 'demi-ballon'. La goutte initiale est écrasée en un disque des bords duquel sont arrachées une multitude de gouttes (Fig. 1.9) beaucoup plus petites que dans les cas précédents.



FIG. 1.9 – Atomisation par cisaillement, Samenfink [62]

- Schmehl [66] propose un classement des différents modes d'atomisation secondaires en fonction du We et du On (Fig. 1.10), en exprimant les limites sous forme de corrélations. 'Shear Breakup' correspond à l'atomisation par cisaillement, 'Multimode Breakup' à l'atomisation multimode, 'Bag Breakup' à l'atomisation en forme de ballon et 'Deformation' aux déformations observées à faible We . On remarque qu'à fort On (gouttes très petites par exemple), quel que soit le We , il n'y a plus d'atomisation.
- Dans les moteurs automobiles et les turbines à gaz, on rencontre également parfois un phénomène d'atomisation dû à une interaction avec la paroi, l'atomisation par éclaboussement ou choc. La goutte en impactant une surface dure produit un film cylindrique parcouru par des instabilités de Savart-Plateau-Rayleigh, qui prend la forme d'une couronne avant de dégénérer en gouttelettes (Fig. 1.11).

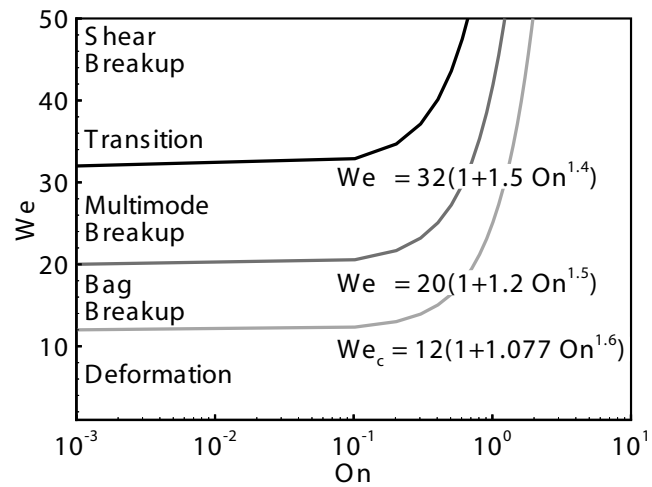


FIG. 1.10 – Régimes d’atomisation d’une goutte [66]



FIG. 1.11 – Atomisation par éclaboussement, Samenfink [62]

1.2.4 Caractère polydisperse des sprays

Les sprays produit par les injecteurs classiques (*cf* section 1.1, atomiseurs pressurisés) sont naturellement polydisperses malgré les efforts produits pour en resserrer la variance.

La Fig. 1.12 qui montre la fonction de densité de probabilité de diamètre pour différentes pressions dans l'atomiseur permet de constater que les sprays sont polydisperses pour toute pression d'injection.

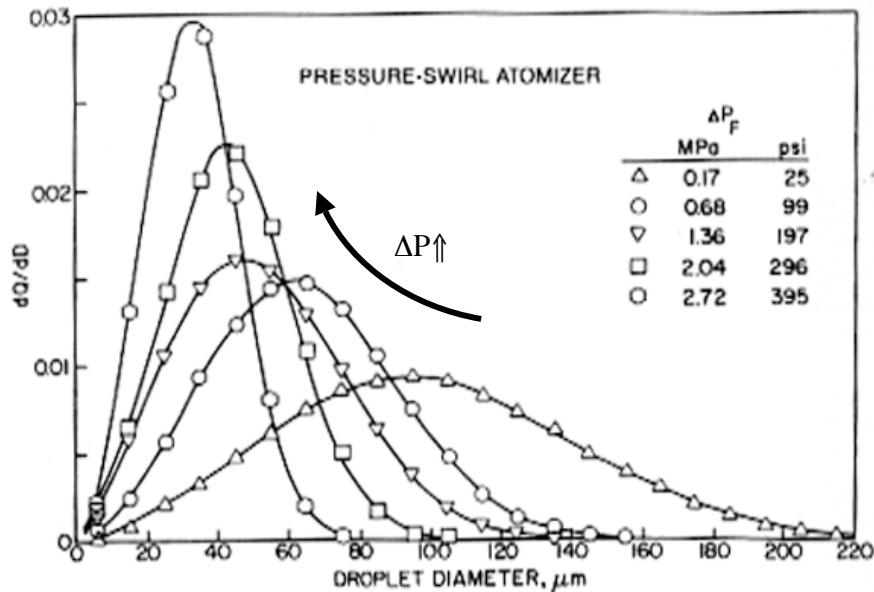


FIG. 1.12 – Fonction de densité de probabilité de taille de goutte selon la pression d'injection, Lefebvre [31]

On remarque de plus que, plus la pression d'injection est faible, plus le diamètre moyen obtenu est important et surtout plus la variance est élevée. On observe ici un rapport 5 entre les variances pour un rapport de pression de 10.

Cette polydispersion engendre une répartition différente de carburant par rapport à l'injecteur idéal qui serait par définition monodisperse. Il est donc crucial pour le dimensionnement des turbines à gaz de pouvoir évaluer la dispersion différenciée du carburant en fonction de la taille des gouttes. De plus, les différences de diamètre moyen et de variance de diamètre entre le régime transitoire et le régime établi de l'injecteur impliquent des trajectoires de particules différentes entre ces deux régimes. Ainsi, les zones riches où l'on cherchera à produire l'allumage et le positionnement des zones de présence du carburant évaporé qui stabilisent la flamme sont très dépendantes des caractéristiques polydisperses de l'injecteur.

Chapitre 2

Approches de la modélisation des écoulements diphasiques

Un système diphasique est un système constitué de deux phases distinctes. Les écoulements diphasiques peuvent être subdivisés en fonction de la topologie des deux phases. On peut citer par exemple les écoulements à surface libre qui présentent deux phases compactes, les écoulements dans les milieux poreux constitués de deux phases continues mais très entremêlées au niveau macroscopique et également les écoulements fluide-particules. Un écoulement fluide-particules est constitué d'une première phase fluide et d'une autre phase qui peut être soit un solide, soit un fluide non-miscible avec le premier. Il faut en plus que la deuxième phase (solide ou fluide non-miscible) soit constituée de plusieurs volumes compacts distincts, ou 'particules'. Elle est alors décrite comme étant la phase 'dispersée', la phase 'continue' étant le fluide porteur. Les éléments dispersés peuvent être des gouttes, des bulles ou des inclusions solides.

Ce type d'écoulements se rencontre dans de nombreux systèmes industriels :

- les aérosols (agricoles, domestiques, médicaux, réfrigérants...).
- les sprays de traitement de surface par projection plasma.
- les précipités de synthèse de nanoparticules.
- les sprays de combustion de particules solides (lits fluidisés de charbon, moteur fusée...).
- les sprays de combustion de gouttelettes de carburant (moteur automobile, réacteur aéronautique, turbine à gas...).

Dans tous ces systèmes, la phase dispersée est généralement considérée comme constituée d'éléments quasi-ponctuels dont la topologie est fixe (faibles changements de forme).

Ainsi, à l'inverse des problématiques de déferlement ou d'impacts, on s'attache moins à la résolution explicite de l'interface entre les deux phases qu'à la détermination précise du mouvement de l'ensemble des particules. Cette priorité est d'autant plus grande que le nombre d'éléments de la phase dispersée est élevé. Or, dans tous les exemples cités précédemment, on atteint rapidement plusieurs milliers voire plusieurs millions de particules.

Afin de décrire ces systèmes complexes, plusieurs approches complémentaires sont apparues. Après un préambule sur la dynamique d'une particule sphérique, trois approches des écoulements diphasiques sont décrites. Puis, leurs avantages et leurs limitations respectifs sont présentés.

2.1 Dynamique d'une particule sphérique

Les bases de la dynamique d'une particule sphérique plongée dans un fluide ont été données par Stokes en 1851 [71]. De nombreuses améliorations ont ensuite été proposées pour prendre en compte les effets de masse ajoutée et d'histoire [4; 6], de turbulence du fluide porteur [64], des efforts exercés par le fluide porteur en l'absence de la particule [73] (appelés aussi efforts dus au gradient de pression fluide), d'accélération de la particule [47] et d'écoulement non uniforme du fluide porteur [38].

Dans le cas général, les coordonnées, la vitesse et la température d'une particule sont avancées en temps selon les relations :

$$\frac{dX_i}{dt} = V_{p,i} \quad (2.1)$$

$$\frac{dV_{p,i}}{dt} = \frac{F_i}{m_p} \quad (2.2)$$

avec i indiquant la direction, \vec{X} la position de la particule, \vec{V}_p sa vitesse, m_p sa masse et F les efforts extérieurs agissant sur la particule.

L'indice p est introduit pour désigner une quantité spécifique à la particule. Cette notation a pour but d'établir une distinction d'échelle avec l'indice 2 qui définit une quantité associée à la phase liquide (quantité qui peut donc être commune à plusieurs particules ou représenter une moyenne sur un ensemble de particules).

Les efforts extérieurs peuvent se décomposer en plusieurs termes selon :

$$\begin{aligned} \frac{F_i}{m_p} = & \underbrace{\frac{\rho_1}{\rho_p} \frac{Du_{s,i}}{Dt}}_{\text{Force de Tchen}} + \underbrace{\left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_p}\right) g_i}_{\text{Archimède généralisé}} + \underbrace{\frac{3}{4} \frac{\rho_1}{\rho_p} \frac{C_d}{d_p} \|\vec{u}_{rel}\| u_{rel,i}}_{\text{Traînée linéarisée}} \\ & + \underbrace{\frac{C_M}{2} \frac{\rho_1}{\rho_p} \left(\frac{Du_{s,i}}{Dt} - \frac{dV_i}{dt}\right)}_{\text{Masse ajoutée}} + \underbrace{\frac{9}{d_p} \frac{\rho_1}{\rho_p} \sqrt{\frac{\nu_1}{\pi}} \int_0^t \frac{Du_{rel,i}}{Dt} \frac{dt'}{\sqrt{t-t'}}}_{\text{Force de Basset}} \end{aligned} \quad (2.3)$$

avec \vec{u}_s vitesse du fluide 'vue' par la particule, $\vec{u}_{rel} = \vec{u}_s - \vec{V}$ vitesse relative entre le fluide et la particule, C_d respectivement coefficients de traînée et de masse ajoutée, ρ_1 masse volumique du fluide, ρ_p masse volumique de la particule, d_p diamètre de la particule et ν_1 viscosité cinétique du fluide.

La vitesse \vec{u}_s représente la vitesse produisant un effet de traînée prenant en compte la structure locale de l'écoulement gazeux autour de la particule. Dans un souci de simplicité, cette vitesse peut être égale à \vec{u}_1 mais, la plupart du temps, une modélisation plus complète est utilisée.

Parmi les différentes forces agissant sur la particule, la force de Tchen permet de tenir compte de l'accélération de la particule par rapport au fluide porteur, la force d'Archimède généralisée inclut les effets gravitationnels et la force d'Archimède classique, la traînée linéarisée est un modèle de la résultante des forces de traînée sur une sphère plongée dans un fluide, la masse ajoutée tient compte des effets inertiels dus à une mince couche de fluide porteur qui se déplace de façon solidaire avec la particule et la force de Basset intègre les effets d'histoire de l'accélération de la particule par rapport au fluide porteur.

Un nombre adimensionnel permet de distinguer les régimes de traînée (laminaire ou turbulent), le Reynolds particulaire Re_p , défini selon :

$$Re_p = \frac{\rho_1 |u_s - V_p| L}{\mu_1} \quad (2.4)$$

où L est une échelle de longueur caractéristique (typiquement $L = d_p$).

A bas Re_p , C_d peut se mettre sous la forme :

$$C_d = \frac{24}{Re_p} \quad (2.5)$$

mais une corrélation empirique due aux travaux de Schiller & Nauman [64] permet d'étendre une expression de C_d jusqu'à $Re_p \sim 1000$:

$$C_d = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \quad (2.6)$$

Cette corrélation est comparée aux mesures de Roos & Willmarth [59] à la Fig.2.1.

Le paramètre adimensionnel qui caractérise l'effet de relaxation de la traînée par rapport au temps caractéristique de l'écoulement est le nombre de Stokes ' St ' défini par :

$$St = \frac{\tau_{drag}}{\tau_{conv}} \quad (2.7)$$

avec τ_{drag} temps de relaxation des particules utilisant la correction turbulente de Tchen [73] et τ_{conv} temps caractéristique de la convection des particules.

$$\tau_{drag} = (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \tau_p \quad (2.8)$$

$$\tau_{conv} = \frac{L}{V_p} \quad (2.9)$$

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_1} \quad (2.10)$$

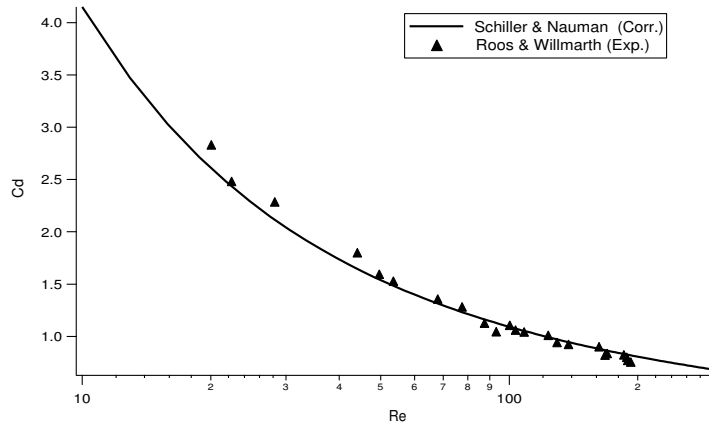


FIG. 2.1 – Corrélation empirique de Schiller & Nauman [64] comparée aux mesures de Roos & Willmarth [59]

Le nombre de Stokes donne une indication sur la facilité avec laquelle les particules vont suivre l’écoulement gazeux. Pour de faibles Stokes ($St \ll 1$), la particule se comporte comme un traceur de l’écoulement gazeux [21]. Pour de très forts Stokes ($St \gg 1$), la particule se comporte de façon inertielle avec une vitesse quasi-égale à sa vitesse d’injection et pour des Stokes de l’ordre de 1, on observe des déplacements “quasi-browniens” (*cf* chapitre 4), c’est-à-dire semblant aléatoires, mais en fait dépendant de l’histoire de la particule. Les effets de ségrégation maximale se produisent pour des Stokes de l’ordre de 1 ([75 ; 21]).

Selon le Stokes et selon la fraction volumique de particules α_2 , la Fig. 2.2 présente l’influence du couplage avec la turbulence du fluide porteur et des particules entre elles [15]. Selon leur charge, les particules peuvent avoir un effet producteur ou dissipateur de la turbulence.

La première méthode de description des écoulements diphasiques et la plus naturelle également est la méthode lagrangienne qui consiste à reprendre les équations présentées ci-dessus pour suivre le mouvement de chaque particule.

2.2 Méthodes lagrangiennes

2.2.1 Calcul lagrangien ‘direct’

Originellement développée comme alternative pour l’étude de la turbulence à l’aide de particules de fluide [46], la méthode de suivi Lagrangien a tout d’abord été utilisée en météorolo-

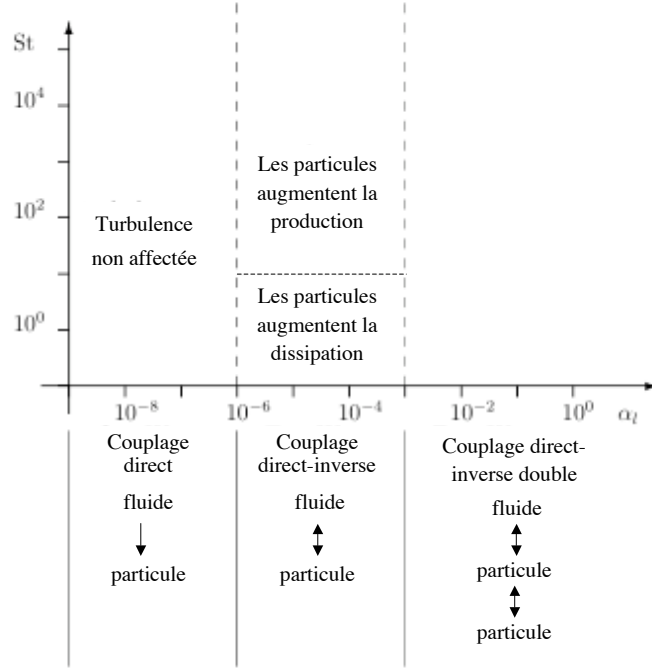


FIG. 2.2 – Influence des particules sur la turbulence du fluide porteur [15]

gie [30] avant de devenir un outil pour l'étude d'écoulements turbulents chargés en particules [2][16][80][82][90].

La description Lagrangienne s'intéresse au mouvement du centre de gravité de chaque particule dont la position et la vitesse sont calculées en intégrant l'équation de quantité de mouvement (2.2).

Pour des particules lourdes ($\rho_p \gg \rho_1$), la traînée et les forces de gravité sont prépondérantes et les coordonnées, la vitesse et la température d'une particule indiquée (k) sont alors avancées en temps selon les relations :

$$\frac{dX_i^{(k)}}{dt} = V_{p,i}^{(k)} \quad (2.11)$$

$$\frac{dV_{p,i}^{(k)}}{dt} = \frac{u_{s,i} - V_i^{(k)}}{\tau_p^{(k)}} \quad (2.12)$$

$$\frac{dT_p^{(k)}}{dt} = \frac{Q^{(k)}}{m_p^{(k)} C_p^{(k)}} \quad (2.13)$$

avec $\vec{X}^{(k)}$ la position de la particule, $\vec{V}_p^{(k)}$ sa vitesse, $m_p^{(k)}$ sa masse, $F_i^{(k)}$ les efforts extérieurs agissant sur la particule, $C_p^{(k)}$ sa chaleur spécifique à pression constante et $Q^{(k)}$ le taux de transfert de chaleur (qui ne peut se mettre sous cette forme que sous l'hypothèse de variations de

température rapides à l'intérieur de la particule).

$\tau_p^{(k)}$ représente le temps caractéristique de traînée de Stokes défini à l'Eq. (2.10).

Comme introduit précédemment, la vitesse 'vue' par la particule notée \vec{u}_s qui représente en lagrangien la vitesse du fluide mesurée le long de la trajectoire de la particule est à différencier de la vitesse Eulérienne du fluide \vec{u}_1 définie en tout point car \vec{u}_s est censée prendre en compte l'influence de l'écoulement autour de la particule pour le calcul de la traînée.

L'évaluation de cette vitesse est très importante dans la mesure où la vitesse du fluide est habituellement résolue sur un maillage fixe alors que la trajectoire de chaque particule est intégrée en temps et en espace. De plus, pour évaluer cette vitesse, deux opérations sont nécessaires. Tout d'abord, il s'agit de repérer dans quelle cellule se situe la particule et ensuite d'interpoler le champ fluide pour calculer \vec{u}_s . Une interpolation est en fait nécessaire pour l'évaluation de tous les termes sources dus au fluide sur la particule (traînée, chaleur...) et pour la distribution aux noeuds des termes sources dus à la particule (couplage inverse, évaporation...).

Si l'on veut éviter de diffuser fortement lors de l'interpolation, la méthode devient vite coûteuse en termes de calcul bien que son efficacité conditionne grandement le comportement dynamique des particules [78].

Dans une simulation Lagrangienne, une particule est censée représenter une réalisation de la phase dispersée. On effectue un certain nombre de prévisions équiprobables (en injectant plusieurs particules avec des conditions initiales légèrement différentes sur un même champ de turbulence fluide par exemple), puis on calcule les moyennes statistiques de l'écoulement et leurs moments à partir de moyennes d'ensemble sur les particules. Comme pour toute méthode de type Monte-Carlo [33] [28], il est nécessaire d'obtenir un grand nombre de réalisations, et donc de simuler un grand nombre de particules, afin d'obtenir des grandeurs statistiquement significatives [78].

En pratique, le nombre de particules est souvent tellement élevé qu'il n'est pas possible de suivre chaque particule. Un groupe de particules physiques (une dizaine à quelques centaines) est alors représenté par une particule dite 'numérique' afin d'alléger la résolution. On n'est donc plus dans un mode de calcul exact du mouvement. Ainsi, plus la particule numérique 'contient' de particules physiques, moins l'interprétation du déplacement de cette particule est immédiate et moins les grandeurs du problème sont simulées de façon satisfaisante [14].

2.2.2 Calcul lagrangien stochastique

Une des variables les plus conditionnantes pour le calcul de la trajectoire d'une particule est la vitesse 'vue' \vec{u}_s , et notamment la prise en compte du caractère turbulent du champ fluide lors de l'interpolation de cette vitesse. Afin de mieux refléter le caractère aléatoire de la turbulence dans l'influence de la traînée, une composante statistique est introduite dans la définition de u_s . Classiquement, cette vitesse est calculée selon un processus d'évolution de Markov-Wiener [77 ; 23] (ce processus permet d'évaluer la probabilité d'un événement à un instant donné connaissant

sa probabilité à l'instant précédent) et l'équation (2.12) s'écrit alors selon le modèle de Langevin :

$$\frac{dX_i^{(k)}}{dt} = V_{p,i}^{(k)} \quad (2.14)$$

$$\frac{dV_{p,i}^{(k)}}{dt} = \frac{u_{s,i} - V_{p,i}^{(k)}}{\tau_p^{(k)}} \quad (2.15)$$

$$\frac{du_{s,i}}{dt} = \mathbf{A}_{s,i} + \mathbf{B}_{s,ij} \frac{\partial W_i}{\partial t} \quad (2.16)$$

avec W incrément infinitésimal du processus de Markov-Wiener, et \mathbf{A} et \mathbf{B} fonctions déterministes définies par le modèle. \mathbf{A} est appelé vecteur de glissement et \mathbf{B} matrice de diffusion.

Il existe de nombreux modèles pour \mathbf{A} et \mathbf{B} [39]. Pour exemple, on peut donner le modèle proposé par Tchen [25] pour une turbulence localement homogène isotrope :

$$\mathbf{A}_{s,i} = -\frac{u_{s,i}}{T_L^*} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{B}_{s,ij} = \sqrt{2 \frac{\langle u_{s,i}^2 \rangle_t}{T_L^*}} \quad (2.18)$$

avec $\langle u_{s,i}^2 \rangle_t = \langle V_{p,i}^{(k)2} \rangle_t \left(1 + \frac{\tau_p^{(k)}}{T_L^*}\right)$, $\langle \rangle_t$ opérateur de moyenne temporelle et T_L^* temps caractéristique Lagrangien. Des modèles plus affinés permettent de prendre en compte les effets turbulents sur la vitesse vue par la particule [87] par utilisation de PDF présumées, méthodes qui présentent du coup plusieurs points communs avec l'approche Eulérienne.

2.3 Calcul semi-Lagrangien/semi-Eulérien

Introduite en météorologie par Robert [58], cette approche se base sur un transport Lagrangien de particules fictives pour construire un champ Eulérien.

A partir des données du champ de vitesse à l'étape temporelle discrète indiquée N , la trajectoire d'une particule fictive qui, selon ce champ de vitesse, aurait eu comme point d'arrivée à l'instant $N + 1$ le noeud du maillage indicé i est reconstituée (Fig. 2.3). L'ensemble des points d'origine est appelé 'grille Lagrangienne'.

Cette trajectoire est obtenue en considérant une équation d'évolution Lagrangienne (du type (2.12)) inverse c'est-à-dire en remontant dans le temps d'où la dénomination anglophone 'backward' (rétrograde).

Le point d'origine de cette trajectoire permet de connaître la valeur originelle des grandeurs qui ont été transportées (masse, température, diamètre. . .) et donc de construire les valeurs au noeud i pour l'instant $N + 1$. Cette opération est réalisée en chaque point du maillage et permet

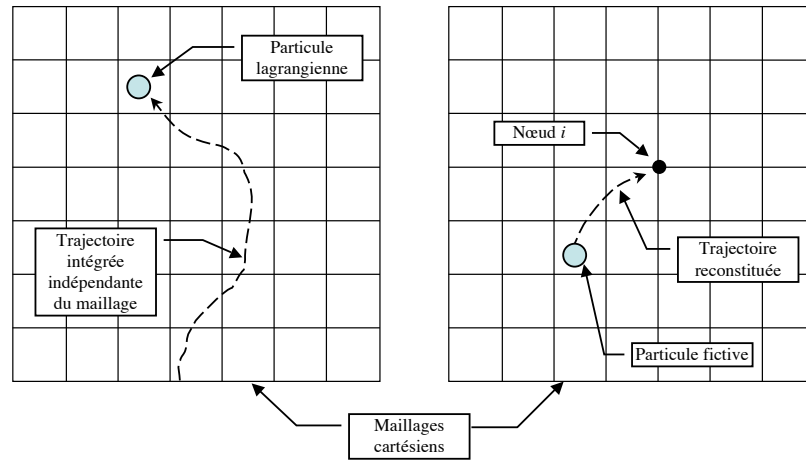


FIG. 2.3 – Schéma illustrant les différences entre le Lagrangien et le semi-Lagrangien

au final d'obtenir un champ discret de grandeurs Eulériennes.

La méthode est dite semi-lagrangienne car le formalisme Lagrangien est utilisé comme intermédiaire de calcul du transport.

Comme pour toutes les méthodes Lagrangiennes, une opération d'interpolation est nécessaire pour déterminer la valeur exacte des grandeurs transportées à l'emplacement de départ de la particule fictive. Cette opération est classiquement une interpolation polynomiale d'ordre trois pour maximiser le rapport coût/précision.

Cependant, une solution obtenue par interpolation n'est en général pas conservative [53]. Si, de plus, l'opérateur polynomial d'interpolation excède le degré 1 (interpolation non-linéaire), la solution présente des oscillations dans les régions de fort gradient [5].

Dans l'optique de vérifier la conservation de la masse, la grille Lagrangienne est alors réorganisée selon la méthode dite d'interpolation en cascade [42].

La Fig. 2.4 propose une visualisation de l'interpolation en cascade sur un maillage cartésien. Le maillage Eulérien est représenté par des carrés vides (\square) et le maillage Lagrangien est représenté par des disques pleins (\bullet). L'ensemble des noeuds Lagrangiens est relié par des splines cubiques. Les deux maillages possèdent deux directions curvilignes principales et chaque noeud est défini par l'intersection d'un couple unique de droites ou de splines.

L'intersection de ces splines avec le maillage Eulérien signalée par des traits obliques (/) définit la première étape d'interpolation. Puis, le long de la spline définie par le point Lagrangien que l'on cherche à interpoler et les deux points issus de la première étape les plus proches, une interpolation curviligne est réalisée.

Par construction, cette méthode est inconditionnellement conservative [42].

Il existe également des méthodes semi-Lagrangiennes dites 'forward' (progressives) où une particule fictive initialement située au noeud i est transportée jusqu'à sa position d'arrivée [43].

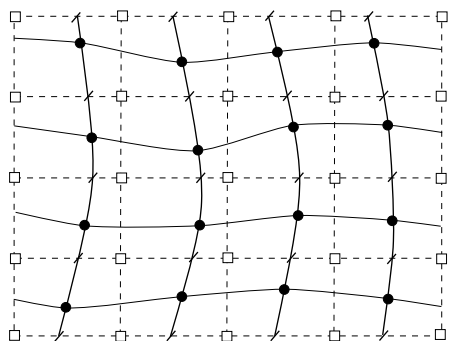


FIG. 2.4 – Interpolation en cascade de la grille Eulérienne sur la grille Lagrangienne

Les grandeurs associées sont ensuite redistribuées aux noeuds voisins de la position d'arrivée. Cette méthode n'est du coup plus inconditionnellement stable [43] et, surtout, nécessite l'utilisation de points de la grille Lagrangienne d'arrivée et non pas de la grille Eulérienne de départ pour effectuer la redistribution.

2.4 Méthodes eulériennes

La description Eulérienne se base sur le suivi de l'ensemble des particules considérées comme un fluide continu respectant les équations de conservation tout comme le fluide porteur. Cette description nécessite généralement un formalisme moins immédiat que la mécanique des corps ponctuels. Seules des grandeurs statistiques moyennes sont transportées et l'évaluation des grandeurs particulières nécessite le transport d'équations supplémentaires ou le calcul de modélisations basées sur des hypothèses plus ou moins restrictives.

Le système Eulérien peut s'obtenir de deux façons différentes aboutissant à un résultat proche au niveau des équations mais avec une différence au niveau de la définition des grandeurs transportées.

2.4.1 Filtrage volumique

Cette approche semble naturelle en LES dans la mesure où le volume de moyenne est à mettre en parallèle avec la taille du filtre.

Les équations des grandeurs moyennes peuvent s'obtenir à partir des équations particulières instantanées, d'une moyenne de Favre volumique notée $\langle \cdot \rangle_{\Omega}$ avec Ω volume de contrôle et d'un indice de phase noté χ_{Φ} valant 1 dans la phase Φ et 0 sinon [11].

L'interface entre les phases est supposée d'épaisseur nulle (le long d'une courbe normale à l'interface χ_{Φ} est une fonction de Heavyside).

Pour toute quantité volumique g_Φ , on définit les relations de commutation :

$$\frac{d\chi_\Phi g_\Phi}{dt} = \chi_\Phi \frac{dg_\Phi}{dt} + g_\Phi (w_{\zeta,i} - u_{\Phi,i}) n_{\Phi,i} \delta_{\zeta,\Phi} \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial \chi_\Phi g_\Phi}{\partial t} = \chi_\Phi \frac{\partial g_\Phi}{\partial t} + g_\Phi w_{\zeta,i} n_{\Phi,i} \delta_{\zeta,\Phi} \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial \chi_\Phi g_\Phi}{\partial x_i} = \chi_\Phi \frac{\partial g_\Phi}{\partial x_i} - n_{\Phi,i} \delta_{\zeta,\Phi} \quad (2.21)$$

avec ζ indice d'interface, $\delta_{\zeta,\Phi} = 1$ à l'interface et 0 partout ailleurs, \vec{n}_Φ la normale à l'interface, \vec{w}_ζ vitesse de l'interface et \vec{u}_Φ vitesse locale de la phase Φ .

De plus, on définit la moyenne massique volumique G_Φ de g_Φ selon :

$$G_\Phi = \langle g_\Phi \rangle_\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_\Omega \rho_\Phi g_\Phi \chi_\Phi d\Omega \quad (2.22)$$

Pour obtenir les équations Euler-Euler à partir des équations de transport monophasiques, la méthode consiste à :

- multiplier les équations monophasiques par χ_Φ ,
- utiliser les relations de commutation si nécessaire,
- appliquer l'opérateur de moyenne sur le volume de contrôle,
- modéliser les termes non fermés.

Le système obtenu par cette méthode (sans explicitation des fermetures) est typiquement :

$$\frac{\partial \alpha_\Phi \rho_\Phi}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_\Phi \rho_\Phi U_{\Phi,j}}{\partial x_j} = - \langle \rho_\Phi (u_{\Phi,i} - w_{\zeta,i}) n_{\Phi,i} \delta_{\zeta,\Phi} \rangle_\Omega \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \alpha_\Phi \rho_\Phi U_{\Phi,i}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_\Phi \rho_\Phi U_{\Phi,j} U_{\Phi,i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_\Phi \rho_\Phi U_{\Phi,j} U_{\Phi,i} - \langle \chi_\Phi \rho_\Phi u_{\Phi,j} u_{\Phi,i} \rangle_\Omega) \quad (2.24)$$

$$+ \left\langle \frac{\partial \chi_\Phi \sigma_{\Phi,ij}}{\partial x_j} \right\rangle_\Omega + \langle \sigma_{\Phi,ij} n_{\Phi,i} \delta_{\zeta,\Phi} \rangle_\Omega \quad (2.25)$$

$$- \langle \rho_\Phi u_{\Phi,i} (u_{\Phi,j} - w_{\zeta,j}) n_{\Phi,i} \delta_{\zeta,\Phi} \rangle_\Omega \quad (2.26)$$

avec α_Φ fraction volumique de la phase Φ , $\sigma_{\Phi,ij} = -\delta_{ij} \frac{\partial p_\Phi}{\partial x_j} + \tau_{\Phi,ij}$ tenseur des contraintes, p_Φ pression et $\tau_{\Phi,ij}$ tenseur visqueux (défini de façon distincte dans les deux phases).

2.4.2 Filtrage statistique

Cette méthode de description tire ses origines de la théorie cinétique des gaz [7] et en particulier de l'étude des gaz raréfiés telle que présentée par Grad [24]. Une analogie d'analyse et de description est effectuée entre la trajectoire erratique des molécules d'un gaz et celle d'une particule dans un champ turbulent.

L'utilisation de fonctions de densité de probabilité pour l'étude d'écoulements monophasiques

turbulents est connue depuis les travaux de Pope [52] et a été décrite en détails pour les écoulements diphasiques en description Lagrangienne par Minier [39].

Un des premiers formalismes Euler-Euler par filtrage statistique a été développé par Simonin [67] introduisant la notion de Mouvement Quasi-Brownien comme complément de la vitesse corrélée. Le concept de champ mésoscopique a ensuite été développé par Simonin et Février [68] et consiste à considérer une moyenne d'ensemble conditionnée par une réalisation du champ fluide. Cette méthode est décrite en détails au chapitre 3.

2.5 Ecoulements polydisperses

Pour les méthodes Lagrangiennes, la caractéristique polydisperse n'engendre pas de traitement particulier si ce n'est l'injection de particules de tailles différentes.

En description Eulérienne, par contre, l'aspect polydisperse apporte un degré de liberté supplémentaire et nécessite une description spécifique. Deux voies principales permettent la description des écoulements polydisperses.

La première consiste à répartir les particules selon leur diamètre en classes discrètes [74 ; 84 ; 86] et à transporter chaque classe comme un écoulement distinct. Dans le cas d'interaction entre particules (collisions...) ou de variation de diamètre, les équations de transport font alors apparaître des termes de transfert entre classes. Cette méthode a le désavantage d'être très coûteuse lorsque le nombre de classes augmente.

La deuxième méthode consiste à présumer la distribution de taille des particules, puis à fermer le modèle en intégrant les quantités particulières sur l'ensemble de la PDF. Le coût est bien moindre mais le formalisme nécessite plus de développements. C'est la méthode retenue dans ce travail et présentée au chapitre 3. Les fermetures sont développées au chapitre 4.

2.6 Comparaison des différentes approches

La multiplicité des différentes approches développées jusqu'à présent reflète l'absence d'une supériorité établie de l'une d'elles. Le bilan des avantages et des inconvénients implique pour chaque approche des avantages et des cas d'applications spécifiques.

La revue effectuée par Mashayek [37] donne une vue globale des méthodes de description des écoulements diphasiques et permet de justifier les comparaisons suivantes.

Les méthodes Lagrangiennes sont particulièrement adaptées aux DNS du fait de leur précision et du faible nombre de particules nécessaire dans ce type de simulation. De plus, elles permettent un traitement simple et intuitif :

- de la polydispersion,
- des collisions,

- de la coagulation,
- de l'évaporation.

En contrepartie, une simulation statistiquement représentative nécessite un nombre de particules élevé, qui devient vite un facteur limitant pour les capacités de calcul. De même, être représentatif en polydisperse (respectivement en instationnaire) nécessite d'être représentatif pour chaque classe de particules (respectivement à chaque instant), ce qui augmente généralement le temps de calcul d'un ordre de grandeur.

Le deuxième point d'attention concerne la nécessité de reconstituer de façon précise des quantités en un point de la trajectoire Lagrangienne (de position inconnue *a priori*) à partir du champ Eulérien (connu uniquement aux points du maillage), ou inversement. Cette opération d'interpolation ou de distribution conditionne de façon non négligeable les résultats obtenus et il n'existe pas d'approche rigoureuse pour intégrer le couplage inverse de la particule sur le fluide [54].

De plus, si la formulation des collisions entre particules est quasi-immédiate, l'algorithme de détection des paires susceptibles de produire une collision est coûteux.

Enfin, en vue d'un calcul parallèle, la possibilité pour une particule numérique d'atteindre en théorie un point quelconque du domaine de calcul ne permet pas de partitionner ce domaine initialement sous peine de déséquilibre ultérieur de la charge des processeurs. Il existe néanmoins des méthodes dynamiques de partitionnement pour redistribuer les particules, avec un coût cependant non négligeable.

Une qualification schématique des méthodes Lagrangiennes soulignerait :

- la précision de la résolution et la simplicité d'interprétation des modèles.
- des coûts de calcul élevés et une complexité reportée sur les traitements algorithmiques et numériques.

Les méthodes Eulériennes sont largement répandues dans les modèles RANS car elles utilisent le même formalisme et la même résolution que la phase porteuse. La description de la phase dispersée étant très similaire à celle de la phase porteuse, il est possible d'utiliser les mêmes algorithmes de traitement et de résolution pour les deux phases.

Leur principal avantage est d'être moins coûteuses que les méthodes Lagrangiennes quand le nombre de particules est élevé.

De plus, les couplages s'expriment toujours en des points de maillage communs aux deux phases, sans nécessiter de traitement numérique particulier.

Cependant, pour déterminer le champ Eulérien, il est nécessaire de transporter plusieurs équations supplémentaires : la densité de particules, la fraction massique et éventuellement des moments d'ordre supérieur. De plus, dans le cas de particules de tailles différentes, une approche par PDF présumée nécessite une équation de plus et une approche par classes, un jeu d'équations supplémentaire par classe.

Par ailleurs, plus la taille des particules est faible, plus la solution est raide numériquement rendant difficile l'étude d'écoulements comportants des particules de très petit diamètre.

Une qualification schématique des méthodes Eulériennes soulignerait :

- la facilité de traitement algorithmique et les plus faibles coûts de calcul.

– la part plus importante des modèles et un plus grand nombre d'équations descriptives.

Il est important de souligner que les résultats obtenus par calcul Lagrangien stochastique sont équivalents d'un point de vue mathématique aux résultats obtenus par calcul Eulérien : dans les deux cas, ce sont des grandeurs statistiques qui sont obtenues. La différence réside dans l'ordre dans lequel elles sont calculées. En Eulérien, les moments sont directement transportés alors qu'en Lagrangien, les moments sont reconstruits lors de la phase de post-traitement. Par exemple, pour obtenir la fraction massique en Lagrangien, on effectue la somme des masses de toutes les particules présentes dans un volume de contrôle donné que l'on divise par la valeur du volume alors qu'en Eulérien, la fraction massique fait directement partie du système d'équations. Mais, au final, ce sont bien les mêmes fractions massiques.

Chapitre 3

Modélisation des écoulements diphasiques polydispersés

3.1 Description statistique de la phase dispersée

Partant de la définition probabiliste de présence d'une particule, l'équation d'évolution spatio-temporelle de la fonction de densité de présence (FDP) des particules est dérivée de manière générale. Appliquée aux moments de la FDP, cette équation permet d'obtenir les équations bilan de grandeurs moyennées et associées à une réalisation statistique du fluide porteur. Les moyennes et la réalisation utilisées permettant de définir la notion de 'mésoscopique' sont introduites pendant la démonstration.

3.1.1 Formalisme mésoscopique

Le but de ce formalisme présenté par [22] est de proposer un cadre théorique clair pour définir les composantes corrélées et décorrélées du champ de vitesse des particules.

Typiquement, dans un écoulement diphase turbulent dilué ou en l'absence d'interactions des particules entre elles, la seule possibilité de corrélation de mouvement des inclusions présentes dans un 'même voisinage' provient du champ gazeux au travers de l'effet de la traînée. Il est par ailleurs nécessaire que, dans ce même voisinage, le champ de vitesse gazeuse présente une 'homogénéité relative'. L'étude statistique de la phase dispersée doit donc s'articuler autour d'une réalisation des vitesses fluides notée \mathcal{H}_f .

Le formalisme mésoscopique repose sur l'hypothèse d'un comportement chaotique des particules inertielles soumises à une même réalisation de la turbulence du gaz \mathcal{H}_f . Le qualificatif 'chaotique' exprime le fait qu'une petite perturbation des conditions initiales de la phase dispersée conduit

à une déviation rapide du champ de vitesse associé.

Pour des temps d'étude finis et grands devant le temps de réponse des particules et le temps caractéristique des grandes échelles de la turbulence, les propriétés statistiques de la phase dispersée deviennent indépendantes de la condition initiale et ne dépendent plus que des interactions avec la turbulence locale. En réalisant une moyenne sur un grand nombre de réalisations, on peut définir une FDP conditionnée par la réalisation du champ de vitesse fluide $f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f)$ qui représente le nombre de particules dont le centre est situé à l'instant t dans le volume $(\vec{x}, \vec{x} + \delta\vec{x})$, se déplaçant à une vitesse de translation \vec{u}_2 comprise entre \vec{c}_p et $\vec{c}_p + \delta\vec{c}_p$, caractérisées par une température θ_2 comprise entre ζ_p et $\zeta_p + \delta\zeta_p$ et présentant un diamètre d_2 compris entre β_p et $\beta_p + \delta\beta_p$.

L'équation d'évolution d'une FDP à trois paramètres peut être dérivée de façon très générale dans l'espace des phases selon :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\vec{c}_p f_2] &= - \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left[\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \\
 - \frac{\partial}{\partial \zeta_p} \left[\left\langle \frac{d\theta_2}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] & \\
 - \frac{\partial}{\partial \beta_p} \left[\left\langle \frac{dd_2}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] & \\
 + \left(\frac{\partial f_2}{\partial t} \right)_{coll} &
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

avec i indice spatial .

Dans l'équation (3.1), $\frac{d}{dt}$ représente la variation temporelle d'une grandeur associée à une unique particule et mesurée d'un point de vue lagrangien, c'est-à-dire en suivant la particule le long de son déplacement.

$\langle \cdot | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \rangle$ représente la moyenne d'ensemble réalisée sur un grand nombre de particules et conditionnée par le fait que pour chaque particule intervenant dans la moyenne les variables \vec{u}_2, θ_2 et d_2 doivent respectivement être égales à \vec{c}_p, ζ_p et β_p .

$\left(\frac{\partial f_2}{\partial t} \right)_{coll}$ représente le taux de variation temporel de la fonction de distribution dû aux interactions particule-particule (collisions, coalescence, atomisation...).

3.1.2 Définition des opérateurs de moyenne

Toutes les moyennes ($\{.\}_2$ et $\langle . \rangle_2$) définies à ce paragraphe vérifient les conditions dites de l'axiome de Reynolds. En prenant comme exemple la moyenne $\{.\}_2$, ces conditions s'écrivent pour :

– la linéarité

$$\{\lambda(\Psi + \mu)\}_2 = \lambda(\{\Psi\}_2 + \mu) \quad (3.2)$$

avec λ et μ constantes et $\Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f)$

– la commutation avec les opérateurs de dérivation temporelle et spatiale

$$\left\{ \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\}_2 = \frac{\partial \{\Psi\}_2}{\partial t} \quad (3.3)$$

Moyenne statistique $\{\cdot\}_2$

La moyenne statistique $\{\cdot\}_2$ de toute grandeur $\Psi(\vec{u}_2, \theta_2, d_2)$ se définit par intégration sur l'espace des phases selon :

$$\{\Psi\}_2 = \frac{1}{n_2} \int \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (3.4)$$

avec $d\vec{c}_p = \prod_{k=1}^{ndim} dc_{p,k}$. La variable n_2 représente le nombre de particules par unité de volume du mélange diphasique appelé aussi densité de particules :

$$n_2 = \int f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (3.5)$$

Moyenne massique $\langle \cdot \rangle_2$

La moyenne massique statistique associée $\langle \cdot \rangle_2$ s'écrit :

$$\langle \Psi \rangle_2 = \frac{1}{\alpha_2 \rho_2} \int \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (3.6)$$

où $\mu_p(\beta_p)$ est la masse d'une particule de diamètre β_p dans l'espace probabiliste et α_2 et ρ_2 représentent respectivement la fraction volumique et la masse volumique moyenne des particules :

$$\mu_p = \rho_2 \pi \beta_p^3 / 6 \quad (3.7)$$

$$\alpha_2 \rho_2 = \int \mu_p(\beta_p) f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (3.8)$$

La moyenne massique statistique est introduite dans le but de simplifier l'écriture de certaines équations bilan (cf section 3.2).

Relations entre les moyennes et les grandeurs transportées

On peut tout d'abord remarquer que les deux moyennes définies précédemment sont neutres l'une par rapport à l'autre. En effet, l'une ou l'autre des opérations de moyenne produit une valeur dans l'espace physique, valeur qui peut alors être considérée comme une simple constante numérique dans l'espace des phases et, grâce à la relation de linéarité (3.2), une composition des deux moyennes sur une grandeur Ψ quelconque engendre :

$$\{ \{ \Psi \}_2 \}_2 = \{ \Psi \}_2 \quad (3.9)$$

$$\langle \langle \Psi \rangle_2 \rangle_2 = \{ \Psi \}_2 \quad \langle 1 \rangle_2 = \{ \Psi \}_2 \quad (3.10)$$

$$\langle \{ \Psi \}_2 \rangle_2 = \{ \Psi \}_2 \quad \langle 1 \rangle_2 = \{ \Psi \}_2 \quad (3.11)$$

$$\{ \langle \Psi \rangle_2 \}_2 = \langle \Psi \rangle_2 \quad \{ 1 \}_2 = \langle \Psi \rangle_2 \quad (3.12)$$

Cette propriété sera très utile pour simplifier les termes de fermeture (*cf* chapitre 4).

De plus, par simple application des deux définitions (3.4) et (3.6), il vient que les variables n_2 , α_2 , ρ_2 et m_2 sont liées par la relation :

$$\alpha_2 \rho_2 = n_2 \{ m_2 \}_2 \quad (3.13)$$

avec

$$m_2 = \rho_2 \pi d_2^3 / 6 \quad (3.14)$$

Et, à l'aide des mêmes définitions, pour toute quantité Ψ , on peut également écrire :

$$\alpha_2 \rho_2 \langle \Psi \rangle_2 = n_2 \{ m_2 \Psi \}_2 \quad (3.15)$$

Il est enfin nécessaire de préciser qu'en monodisperse, ces deux moyennes sont absolument équivalentes. En effet, pour d_2 constant et ρ_2 indépendante du diamètre, de la vitesse et de la température, on a :

$$\alpha_2 \rho_2 = n_2 \{ m_2 \}_2 = n_2 \rho_2 \pi d_2^3 / 6 \quad (3.16)$$

En utilisant cette propriété dans la relation (3.15), il vient :

$$\begin{aligned} \langle \Psi \rangle_2 &= \frac{n_2}{\alpha_2 \rho_2} \{ m_2 \Psi \}_2 \\ &= \frac{n_2}{\alpha_2 \rho_2} \frac{1}{n_2} \int \mu_p(\beta_p) \Psi f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\ &= \frac{n_2 \rho_2 \pi d_2^3 / 6}{\alpha_2 \rho_2} \frac{1}{n_2} \int \Psi f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\ &= \frac{1}{n_2} \int \Psi f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\ &= \{ \Psi \}_2 \end{aligned} \quad (3.17)$$

Vitesse mésoscopique

Dans le formalisme présenté par Février *et al* [22], en reprenant leurs notations, chaque particule indicée k possède une vitesse $\vec{V}_p^{(k)}(\vec{X}_p^{(k)}, t, \mathcal{H}_f)$, où p est l'indice des grandeurs particulières correspondant à l'indice $_2$ dans ce travail, et les auteurs dénomment 'vitesse mésoscopique eulérienne de la phase dispersée' la quantité

$$\tilde{v}_{p,i}(\vec{x}, t, \mathcal{H}_f) = \left\{ V_{p,i}^{(k)}(\vec{X}_p^{(k)}, t, \mathcal{H}_f) \right\}_2 \quad (3.18)$$

A cette vitesse moyenne, on associe la composante résiduelle de vitesse $\vec{\delta V}_p^{(k)}$ de la particule k définie selon :

$$V_{p,i}^{(k)}(\vec{X}_p^{(k)}, t, \mathcal{H}_f) = \tilde{v}_{p,i}(\vec{x}, t, \mathcal{H}_f) + \delta V_{p,i}^{(k)}(\vec{X}_p^{(k)}, t, \mathcal{H}_f) \quad (3.19)$$

En pratique, la vitesse $\tilde{v}_{p,i}$ représente la composante commune à toutes les particules de l'échantillon et $\delta V_{p,i}^{(k)}$ la composante décorrelée propre à chaque particule.

Sans rien enlever à la généralité du formalisme, il est tout à fait possible de définir une vitesse mésoscopique pondérée par la masse

$$\vec{U}_2 = \left\langle \vec{V}_p^{(k)}(\vec{X}_p^{(k)}, t, \mathcal{H}_f) \right\rangle_2 \quad (3.20)$$

et une composante décorrelée propre à chaque particule \vec{u}_2'' définie selon :

$$\vec{V}_p^{(k)}(\vec{X}_p^{(k)}, t, \mathcal{H}_f) = \vec{U}_2 + \vec{u}_2'' \quad (3.21)$$

Pour des raisons d'écriture de flux et de termes sources en vue du codage, c'est la vitesse \vec{U}_2 qui a été retenue dans le présent travail pour développer le système d'équations avec un choix de notations simplifiées par rapport à Février *et al* [22].

Grandeurs moyennes et grandeurs décorrelées

De manière générale, les quantités particulières seront dénommées à l'aide de minuscules, sans être indicées selon la particule, et les quantités moyennes seront dénommées à l'aide de majuscules. Ainsi, pour toute quantité particulière a_2 , on définit la quantité moyenne

$$A_2 = \langle a_2 \rangle_2 \quad (3.22)$$

et la quantité particulière décorrelée associée :

$$a_2'' = a_2 - A_2 \quad (3.23)$$

$$\langle a_2'' \rangle_2 = 0 \quad (3.24)$$

L'utilisation du symbole " permet de différencier les grandeurs décorréelées statistiquement des grandeurs décorréelées temporellement (appelées parfois aussi turbulentes) habituellement caractérisées par le symbole '.

La vitesse mésoscopique est ici notée $\{\vec{u}_2\}_2$ ($\{\vec{u}_2\}_2 = \vec{v}_p$ avec les notations de [22]) et son équivalent pondéré par la masse est appelée vitesse mésoscopique massique et notée $\vec{U}_2 = \langle \vec{u}_2 \rangle_2$:

$$\vec{U}_2 = \frac{1}{\alpha_2 \rho_2} \int \mu_p(\beta_p) \vec{c}_p f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (3.25)$$

On définit également une température mésoscopique massique $T_2 = \langle \theta_2 \rangle_2$:

$$T_2 = \frac{1}{\alpha_2 \rho_2} \int \mu_p(\beta_p) \zeta_p f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (3.26)$$

A ces deux grandeurs moyennes, on associe naturellement les quantités décorréelées \vec{u}''_2 et θ''_2 :

$$\vec{u}''_2 = \vec{u}_2 - \vec{U}_2 \quad (3.27)$$

$$\theta''_2 = \theta_2 - T_2 \quad (3.28)$$

En prenant la moyenne statistique de l'équation (3.27) et en utilisant la relation de neutralité des moyennes entre elles (3.9), la relation entre la vitesse mésoscopique de [22], la vitesse mésoscopique massique \vec{U}_2 et la vitesse décorréelée \vec{u}''_2 s'écrit :

$$\{\vec{u}_2\}_2 = \langle \vec{u}_2 \rangle_2 + \{\vec{u}''_2\}_2 \quad (3.29)$$

avec $\{\vec{u}''_2\}_2 \neq \vec{0}$.

Dans le cas où la chaleur spécifique $C_{p,2}$ des particules est constante par rapport aux variables d'intégration de la FDP, les enthalpies particulières, moyennes et décorréelées (respectivement h_2 , H_2 et h''_2) sont directement définies par proportionnalité avec les températures particulières, moyennes et décorréelées (respectivement θ_2 , T_2 et θ''_2) :

$$h_2 = C_{p,2} \theta_2 \quad (3.30)$$

$$H_2 = C_{p,2} T_2 \quad (3.31)$$

$$h''_2 = C_{p,2} \theta''_2 \quad (3.32)$$

3.1.3 Equation générale d'Enskog

A partir de l'équation d'évolution de la FDP (3.1) et en multipliant par la quantité générique $\Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p)$ il est possible, en prenant la moyenne massique statistique du tout, d'obtenir une équation d'évolution générale de toute grandeur moyennée appelée équation générale d'Enskog [81].

Cette équation, dont la démonstration est présentée ici, va servir de base pour le calcul du transport de tout moment de la FDP.

Afin d'alléger la notation, $f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f)$ sera désormais simplement écrit f_2 lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté. En multipliant (3.1) par $\Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p)$ et prenant la moyenne massique statistique du produit, on trouve :

$$\begin{aligned}
 & \alpha_2 \rho_2 \left\langle \left(\frac{\partial f_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [c_{p,i} f_2] \right) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) \right\rangle_2 = \\
 & \int \frac{\partial f_2}{\partial t} \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p + \int \frac{\partial}{\partial x_i} [c_{p,i} f_2] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p = \\
 & - \int \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left[\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\
 & - \int \frac{\partial}{\partial \zeta_p} \left[\left\langle \frac{d\theta_2}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\
 & - \int \frac{\partial}{\partial \beta_p} \left[\left\langle \frac{dd_2}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\
 & + \int \left(\frac{\partial f_2}{\partial t} \right)_{coll} \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

D'après l'axiome de Reynolds, les opérateurs de dérivation $\frac{\partial}{\partial t}$ et $\frac{\partial}{\partial x_i}$ peuvent être commutés avec l'opérateur d'intégration.

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p + \frac{\partial}{\partial x_i} \int \mu_p(\beta_p) c_{p,i} \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{\text{A}} = \\
 & \underbrace{- \int \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left[\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{\text{B}} \\
 & \underbrace{- \int \frac{\partial}{\partial \zeta_p} \left[\left\langle \frac{d\theta_2}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{\text{C}} \\
 & \underbrace{- \int \frac{\partial}{\partial \beta_p} \left[\left\langle \frac{dd_2}{dt} \middle| \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{\text{D}} \\
 & + \underbrace{\int \left(\frac{\partial f_2}{\partial t} \right)_{coll} \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{\text{C}(m_2\Psi)}
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

En accord avec la définition de la moyenne spécifiée à l'équation (3.6), le premier membre de l'égalité s'écrit :

$$A = \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 \langle \Psi \rangle_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle u_{2,i} \Psi \rangle_2 \quad (3.35)$$

Pour raison de simplification d'écriture, $\Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p)$ a été remplacé par Ψ dans cette équation. L'une ou l'autre de ces notations sera désormais indifféremment employée dans les cas où il n'y a aucune ambiguïté.

Les termes du second membre de l'égalité (3.34) vont maintenant être étudiés tour à tour. Néanmoins, le terme source d'interaction des particules entre elles $\mathbb{C}(m_2 \Psi)$ ne sera pas développé pour l'instant.

Par développement de la dérivée du produit, le terme B s'écrit :

$$\begin{aligned} B = & - \underbrace{\int \left[\frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \right] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{B_1} \\ & - \underbrace{\int \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) \frac{\partial f_2}{\partial c_{p,i}} d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{B_2} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Le terme B_2 va être maintenant intégré par parties par rapport à $c_{p,i}$:

$$B_2 = \left[\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \mu_p \Psi f_2 \right] - \int \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left(\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \mu_p \Psi \right) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (3.37)$$

En développant la dérivée du produit contenu dans l'expression de B_2 , l'équation (3.36) s'écrit finalement :

$$\begin{aligned} B = & - \underbrace{\int \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{B_1} \\ & - \underbrace{\left[\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \mu_p \Psi f_2 \right]_{\Omega}}_{B_{21}} \\ & + \underbrace{\int \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{B_{22} = -B_1} \\ & + \underbrace{\int \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \mu_p(\beta_p) \frac{\partial \Psi}{\partial c_{p,i}} f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{B_{23}} \end{aligned} \quad (3.38)$$

où Ω représente l'espace des possibles pour la variable $c_{p,i}$.

Nous quittons un instant le domaine mathématique pour, à partir d'arguments physiques, simplifier le terme B_{21} .

Toute FDP "réaliste" spécifie une probabilité nulle d'occurrence des valeurs limites supérieures d'une variable aléatoire. Ainsi, une particule de taille infinie, ou se déplaçant à une vitesse infinie (dans le sens positif ou négatif) n'a aucune chance d'exister. Par contre, on peut se poser la question de savoir si une particule de taille nulle (obtenue après évaporation par exemple) possède une probabilité non nulle d'exister. Dans un premier temps et dans un but de simplification, nous considérerons que ce n'est pas possible.

Sous réserve de "bon comportement" des fonctions Ψ et $\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle$, on considère que f_2 est prédominante par rapport à ces fonctions aux bornes du domaine d'intégration - ce qui sera justifié *a posteriori*, voir équation (4.8) - et qu'en conséquent :

$$B_{21} = 0 \quad (3.39)$$

Enfin, le terme B_{23} n'est que l'expression d'une moyenne d'où, finalement :

$$\begin{aligned} B &= B_{23} \\ &= \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial u_{2,i}} \right\rangle_2 \end{aligned} \quad (3.40)$$

De même, par simple remplacement de notation, on peut montrer que :

$$C = \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{d\theta_2}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta_2} \right\rangle_2 \quad (3.41)$$

Pour le calcul du terme D, la dépendance de μ_p en β_p introduit une différence que l'on va développer. On utilise l'identité (3.7) pour développer $\mu(\beta_p)$:

$$\begin{aligned} D &= - \int \frac{\partial}{\partial \beta_p} \left[\left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \mu_p(\beta_p) \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\ &= -\rho_2 \frac{\pi}{6} \int \frac{\partial}{\partial \beta_p} \left[\left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle f_2 \right] \beta_p^3 \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \end{aligned} \quad (3.42)$$

Par développement de la dérivée du produit, on obtient :

$$\begin{aligned} D &= -\rho_2 \frac{\pi}{6} \underbrace{\int \left[\frac{\partial}{\partial \beta_p} \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \right] \beta_p^3 \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{D_1} \\ &\quad - \rho_2 \frac{\pi}{6} \underbrace{\int \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \beta_p^3 \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) \frac{\partial f_2}{\partial \beta_p} d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{D_2} \end{aligned} \quad (3.43)$$

On intègre ensuite le terme D_2 par parties par rapport à β_p :

$$D_2 = \left[\left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \beta_p^3 \Psi f_2 \right] - \int \frac{\partial}{\partial \beta_p} \left[\left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \beta_p^3 \Psi \right] f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (3.44)$$

En développant la dérivée du produit des trois éléments, l'équation (3.42) s'écrit maintenant :

$$\begin{aligned} D = -\rho_2 \frac{\pi}{6} \left\{ \underbrace{\int \left[\frac{\partial}{\partial \beta_p} \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \right] \beta_p^3 \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{D_1} \right. \\ + \underbrace{\left[\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \beta_p^3 \Psi f_2 \right]_{\Omega'}}_{D_{21}} \\ - \underbrace{\int \left[\frac{\partial}{\partial \beta_p} \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \right] \beta_p^3 \Psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p) f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{D_{22} = -D_1} \\ - \underbrace{\int \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \beta_p^3 \frac{\partial \Psi}{\partial \beta_p} f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{D_{23}} \\ \left. - \underbrace{\int \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \frac{\partial \beta_p^3}{\partial \beta_p} \Psi f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p}_{D_{24}} \right\} \end{aligned} \quad (3.45)$$

où Ω' représente l'espace des possibles pour la variable β_p .

Par le même raisonnement que pour le terme B_{21} , sous réserve des mêmes hypothèses que précédemment sur les fonctions f_2 , $\left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle$ et Ψ , et en considérant de plus que f_2 est prédominante devant β_p^3 (ce qui est vrai pour toute fonction de type exponentielle décroissante par exemple), on a de même :

$$D_{21} = 0 \quad (3.46)$$

En dérivant β_p^3 , D_{24} peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} D_{24} &= \int \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle 3\beta_p^2 \Psi f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\ &= 3 \int \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \beta_p^3 \frac{\Psi}{\beta_p} f_2 d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \end{aligned} \quad (3.47)$$

Si l'on injecte à présent les résultats des équations (3.46) et (3.47) dans l'équation (3.45) et que

l'on simplifie les termes D_1 et D_{22} , on obtient :

$$\begin{aligned}
 D &= \rho_2 \frac{\pi}{6} (D_{23} + D_{24}) \\
 &= \rho_2 \frac{\pi}{6} \int \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \beta_p^3 f_2 \left[3 \frac{\Psi}{\beta_p} + \frac{\partial \Psi}{\partial \beta_p} \right] d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\
 &= \int \left\langle \frac{dd_2}{dt} | \vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p \right\rangle \mu_p(\beta_p) f_2 \left[3 \frac{\Psi}{\beta_p} + \frac{\partial \Psi}{\partial \beta_p} \right] d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\
 &= \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{dd_2}{dt} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial d_2} + 3 \frac{\Psi}{d_2} \right] \right\rangle_2
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

En réunissant les calculs des valeurs A, B, C et D, on en déduit une équation de transport moyennée pour toute grandeur Ψ , aussi appelée "équation générale d'Enskog" :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 \langle \Psi \rangle_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle u_{2,i} \Psi \rangle_2 &= \mathbb{C}(m_2 \Psi) \\
 &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial u_{2,i}} \right\rangle_2 \\
 &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{d\theta_2}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta_2} \right\rangle_2 \\
 &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{dd_2}{dt} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial d_2} + 3 \frac{\Psi}{d_2} \right] \right\rangle_2
 \end{aligned} \tag{3.49}$$

En décomposant la vitesse \vec{u}_2 en deux composantes selon (3.27) et à l'aide de la linéarité de $\langle . \rangle_2$, le terme $U_{2,i}$ peut être sorti de l'opérateur de moyenne massique statistique. On peut alors faire apparaître le transport de Ψ selon la vitesse moyenne \vec{U}_2 et un terme de flux associé au transport par les vitesses décorréelées :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 \langle \Psi \rangle_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 U_{2,i} \langle \Psi \rangle_2 &= \mathbb{T}(\Psi) + \mathbb{C}(m_2 \Psi) \\
 &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial u_{2,i}} \right\rangle_2 \\
 &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{d\theta_2}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta_2} \right\rangle_2 \\
 &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{dd_2}{dt} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial d_2} + 3 \frac{\Psi}{d_2} \right] \right\rangle_2
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

L'opérateur \mathbb{T} est appelé opérateur de flux décorrélé et est défini selon :

$$\begin{aligned}
 \mathbb{T}(\Psi) &= - \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle u_{2,i} \Psi \rangle_2 \\
 &= - \frac{\partial}{\partial x_i} n_2 \{ m_2 u_{2,i} \Psi \}_2
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

3.2 Equations bilan de la phase dispersée

Partant de l'équation générale d'Enskog, les équations de transport des variables mésoscopiques du problème sont obtenues en moyennant des quantités particulières bien choisies.

3.2.1 Densité de particules

En choisissant $\Psi(\vec{u}_2, \theta_2, d_2) = \frac{1}{m_2}$ dans l'équation (3.50), on obtient l'équation de transport de la densité de particules n_2 :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{1}{m_2} \rangle_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 U_{2,i} \langle \frac{1}{m_2} \rangle_2 = \mathbb{T}\left(\frac{1}{m_2}\right) + \mathbb{C}\left(m_2 \frac{1}{m_2}\right) + \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{dd_2}{dt} \left[\frac{\partial \frac{1}{m_2}}{\partial d_2} + 3 \frac{\frac{1}{m_2}}{d_2} \right] \right\rangle_2 \quad (3.52)$$

En utilisant l'identité $d\left(\frac{1}{m_2}\right) = -3 \frac{d(d_2)}{d_2 m_2}$, il vient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{1}{m_2} \rangle_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 U_{2,i} \langle \frac{1}{m_2} \rangle_2 &= \mathbb{T}\left(\frac{1}{m_2}\right) + \mathbb{C}(1) + \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{dd_2}{dt} \left[-\frac{3}{m_2 d_2} + \frac{3}{m_2 d_2} \right] \right\rangle_2 \\ &= \mathbb{T}\left(\frac{1}{m_2}\right) + \mathbb{C}(1) \end{aligned} \quad (3.53)$$

D'après l'identité (3.15), il est possible d'écrire :

$$\alpha_2 \rho_2 \langle \frac{1}{m_2} \rangle_2 = n_2 \quad (3.54)$$

En injectant ce résultat dans l'équation (3.53), il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} n_2 U_{2,i} = \mathbb{T}\left(\frac{1}{m_2}\right) + \mathbb{C}(1) \quad (3.55)$$

Le terme $\mathbb{C}(1)$ représente la variation de densité de particules par atomisation ou coalescence. $\mathbb{T}\left(\frac{1}{m_2}\right)$ représente le flux de particules par transport décorrélé moyen que l'on appellera plus simplement 'flux décorrélé de particules'. Ces deux termes sont à modéliser.

Il est important de souligner qu'en monodisperse, d'après l'équivalence (3.17) entre les moyennes $\langle . \rangle_2$ et $\{.\}_2$, il vient que **le terme de flux décorrélé $\mathbb{T}\left(\frac{1}{m_2}\right)$ est nul.**

3.2.2 Fraction massique

En choisissant $\Psi(\vec{u}_2, \theta_2, d_2) = 1$ dans l'équation (3.50), l'équation de transport moyen de la fraction massique de particules $\alpha_2 \rho_2$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 \langle 1 \rangle_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 U_{2,i} \langle 1 \rangle_2 &= \mathbb{T}(1) + \mathbb{C}(m_2) \\ &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{du_{2,i}}{dt} \frac{\partial(1)}{\partial u_{2,i}} \right\rangle_2 \\ &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{d\theta_2}{dt} \frac{\partial(1)}{\partial \theta_2} \right\rangle_2 \\ &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{dd_2}{dt} \left[\frac{\partial(1)}{\partial d_2} + \frac{3}{d_2} \right] \right\rangle_2 \end{aligned} \quad (3.56)$$

En simplifiant les termes de moyenne, l'équation de transport de α_2 s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 U_{2,i} = \mathbb{C}(m_2) + \underbrace{\alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{3}{d_2} \frac{dd_2}{dt} \right\rangle_2}_{\Gamma_2} \quad (3.57)$$

Γ_2 représente le flux massique moyen à travers la(les) interface(s) par évaporation ou condensation.

En remarquant que

$$\alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{3}{d_2} \frac{dd_2}{dt} \right\rangle_2 = n_2 \left\{ \frac{dd_2}{dt} \frac{3m_2}{d_2} \right\}_2 = n_2 \left\{ \frac{dm_2}{dt} \right\}_2 \quad (3.58)$$

le terme source d'évaporation peut aussi s'écrire :

$$\Gamma_2 = n_2 \left\{ \frac{dm_2}{dt} \right\}_2 \quad (3.59)$$

$\mathbb{C}(m_2)$ représente l'échange moyen de masse par atomisation ou coalescence. Comme, lors d'interactions, la masse totale du nuage se conserve, ce terme est identiquement nul.

Comme ρ_2 est supposé constant, en divisant l'équation ci-dessus par ρ_2 , il est possible d'obtenir l'équation de transport de la fraction volumique de particules α_2 :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 U_{2,i} = \frac{\Gamma_2}{\rho_2} \quad (3.60)$$

3.2.3 Densité de surface

La densité de surface Σ_2 représente la surface moyenne de l'interface du nuage de particules par mètre cube. Pour des particules sphériques, Σ_2 s'écrit :

$$\Sigma_2 = n_2 \{\pi d_2^2\}_2 \quad (3.61)$$

$$\equiv n_2 \{\sigma_2\}_2 \quad (3.62)$$

avec σ_2 la surface de l'interface d'une particule.

D'après l'identité (3.15), Σ_2 s'écrit aussi :

$$\Sigma_2 = \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{\pi d_2^2}{m_2} \right\rangle_2 \quad (3.63)$$

En choisissant $\Psi(\vec{u}_2, \theta_2, d_2) = \pi d_2^2 / m_2$ dans l'équation (3.50), l'équation de transport moyen de Σ_2 s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{\pi d_2^2}{m_2} \right\rangle_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 U_{2,i} \left\langle \frac{\pi d_2^2}{m_2} \right\rangle_2 &= \mathbb{T} \left(\frac{\pi d_2^2}{m_2} \right) + \mathbb{C} \left(m_2 \frac{\pi d_2^2}{m_2} \right) \\ &+ \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{dd_2}{dt} \left[\frac{\partial \left(\frac{\pi d_2^2}{m_2} \right)}{\partial d_2} + 3 \frac{\pi d_2}{m_2} \right] \right\rangle_2 \end{aligned} \quad (3.64)$$

En remarquant que $d \left(\frac{d_2^2}{m_2} \right) = -\frac{d_2 d(d_2)}{m_2}$, il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \Sigma_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \Sigma_2 U_{2,i} = \mathbb{T}(\sigma_2) + \mathbb{C}(\pi d_2^2) + \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{dd_2}{dt} \left[-\frac{\pi d_2}{m_2} + 3 \frac{\pi d_2}{m_2} \right] \right\rangle_2 \quad (3.65)$$

Enfin, en jouant sur l'écriture des termes moyennés à l'aide de l'identité (3.15), l'équation de transport peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \Sigma_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \Sigma_2 U_{2,i} = \mathbb{T}(\sigma_2) + \underbrace{\mathbb{C}(\sigma_2)}_{\Gamma_s} + n_2 \left\{ \frac{d\sigma_2}{dt} \right\}_2 \quad (3.66)$$

Pour des particules non déformables, Γ_s représente la variation moyenne d'interface par évaporation ou condensation.

$\mathbb{C}(\sigma_2)$ représente la variation d'interface par atomisation ou coalescence.

$\mathbb{T}(\sigma_2)$ représente la variation d'interface engendrée par le transport décorrélié. Ces trois termes sont à modéliser.

Il est important de souligner que, de même que pour la densité de particules, en monodisperse, l'équivalence (3.17) entre les moyennes $\langle . \rangle_2$ et $\{.\}_2$ implique que le terme de flux décorrélié $\mathbb{T}(\sigma_2)$ est nul.

En multipliant σ_2 par une fonction $k(x, t)$ (constante par rapport à d_2 , u_2 et θ_2), il est possible de trouver une équation de transport de $k\Sigma_2$. Cette équation s'avérera utile lorsque la forme de la FDP sera présumée :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} k\Sigma_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} k\Sigma_2 U_{2,i} &= \mathbb{T}(k\sigma_2) + \mathbb{C}(k\sigma_2) + \alpha_2 \rho_2 < \frac{dd_2}{dt} \left[-\frac{k\pi d_2}{m_2} + 3\frac{k\pi d_2}{m_2} \right] >_2 \\
 &= \mathbb{T}(k\sigma_2) + \mathbb{C}(k\sigma_2) + \alpha_2 \rho_2 < k \frac{d\sigma_2}{dt} \frac{1}{m_2} >_2 \\
 &= \mathbb{T}(k\sigma_2) + \mathbb{C}(k\sigma_2) + k\alpha_2 \rho_2 < \frac{d\sigma_2}{dt} \frac{1}{m_2} >_2 \\
 &= \mathbb{T}(k\sigma_2) + \mathbb{C}(k\sigma_2) + k n_2 \left\{ \frac{d\sigma_2}{dt} \right\}_2 \\
 &= \mathbb{T}(k\sigma_2) + \mathbb{C}(k\sigma_2) + k \Gamma_s
 \end{aligned} \tag{3.67}$$

3.2.4 Quantité de mouvement

Pour la Quantité De Mouvement (QDM), on préfère utiliser la forme (3.49) de l'équation d'Enskog (3.50) pour mieux démontrer l'apparition de moments doubles de vitesse. Ainsi, en choisissant $\Psi(\vec{u}_2, \theta_2, d_2) = u_{2,i}$ dans l'équation (3.49), l'équation de transport moyen de la quantité de mouvement des particules $\alpha_2 \rho_2$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 < u_{2,i} >_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 < u_{2,i} u_{2,j} >_2 &= \mathbb{C}(m_2 u_{2,j}) + \alpha_2 \rho_2 < \frac{du_{2,i}}{dt} \frac{\partial u_{2,i}}{\partial u_{2,j}} >_2 \\
 + \alpha_2 \rho_2 < \frac{dd_2}{dt} \left[\frac{3u_{2,j}}{d_2} \right] >_2 &
 \end{aligned} \tag{3.68}$$

avec sommation sur l'indice j .

En simplifiant et en remplaçant $\frac{dd_2}{dt} \frac{3}{d_2}$ selon la relation (3.58), il vient :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 < u_{2,j} >_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 < u_{2,i} u_{2,j} >_2 &= \mathbb{C}(m_2 u_{2,j}) + \alpha_2 \rho_2 < \underbrace{\frac{du_{2,j}}{dt}}_{< \frac{\mathbf{F}_j}{m_2} >_2} >_2 + n_2 \underbrace{\left\{ u_{2,j} \frac{dm_2}{dt} \right\}_2}_{\Gamma_{u,j}} \\
 &
 \end{aligned} \tag{3.69}$$

où \mathbf{F}_j représente l'ensemble des forces extérieures auxquelles est soumise une particule dans la direction j et $\Gamma_{u,j}$ représente la variation de QDM dans la direction j due aux variations de masse des particules.

$\langle u_{2,i}u_{2,j} \rangle_2$ est développé à l'aide de la décomposition des vitesses (3.27) :

$$\begin{aligned} \langle u_{2,i}u_{2,j} \rangle_2 &= \langle U_{2,i}U_{2,j} + u''_{2,i}u''_{2,j} + U_{2,j}u''_{2,i} + U_{2,i}u''_{2,j} \rangle_2 \\ &= \langle U_{2,i}U_{2,j} \rangle_2 + \langle u''_{2,i}u''_{2,j} \rangle_2 + \langle U_{2,i}u''_{2,j} \rangle_2 + \langle U_{2,j}u''_{2,i} \rangle_2 \quad (3.70) \\ &= U_{2,i}U_{2,j} + \langle u''_{2,i}u''_{2,j} \rangle_2 + U_{2,j} \langle u''_{2,i} \rangle_2 + U_{2,i} \langle u''_{2,i} \rangle_2 \end{aligned}$$

Par définition de la moyenne massique statistique, les deux derniers termes sont identiquement nuls et l'équation (3.69) s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 U_{2,j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 U_{2,i} U_{2,j} = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,i} u''_{2,j} \rangle_2}_{\mathbb{T}(u''_{2,j})} + \mathbb{C}(m_2 u_{2,j}) + \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{\mathbf{F}_j}{m_2} \rangle_2 + \Gamma_{u,j} \quad (3.71)$$

$\mathbb{T}(u''_{2,j})$ représente le transport de quantité de mouvement par la vitesse décorrélée. $\mathbb{C}(m_2 u_{2,i})$ représente les échanges de quantité de mouvement par interactions entre particules (collision, atomisation, coalescence). Comme, lors d'interactions, l'impulsion totale du nuage se conserve, ce terme est identiquement nul. Les termes \mathbf{F}_j , $\Gamma_{u,j}$ et $\mathbb{T}(u''_{2,j})$ sont par contre à modéliser.

3.2.5 Energie quasi-brownienne (E_{QB})

Dans le but de retrouver une partie de l'information perdue par l'opération de moyenne, il est possible de transporter une énergie cinétique décorrélée par unité de masse qui est appelée Energie Quasi-Brownienne (E_{QB}) en référence à la théorie cinétique des gaz :

$$E_{QB} = \frac{1}{2} \langle u''_{2,j} u''_{2,j} \rangle_2 \quad (3.72)$$

avec sommation sur l'indice j .

En choisissant $\Psi(\vec{u}_2, \theta_2, d_2) = \frac{1}{2} u''_{2,j} u''_{2,j}$ dans l'équation (3.49), l'équation de transport moyen de l'énergie quasi-brownienne s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 E_{QB} + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{1}{2} u''_{2,j} u''_{2,j} u_{2,i} \rangle_2 &= \mathbb{C}(\frac{1}{2} m_2 u''_{2,j} u''_{2,j}) \\ &+ \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{du_{2,i}}{dt} \frac{\partial}{\partial u_{2,i}} \frac{1}{2} u''_{2,j} u''_{2,j} \rangle_2 \quad (3.73) \\ &+ \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{dd_2}{dt} \frac{3}{2d_2} u''_{2,j} u''_{2,j} \rangle_2 \end{aligned}$$

Le terme $\langle \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}u_{2,i} \rangle_2$ peut être décomposé selon :

$$\begin{aligned}
 \langle \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}u_{2,i} \rangle_2 &= \langle \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}u''_{2,i} + \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}U_{2,i} \rangle_2 \\
 &= \langle \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}u''_{2,i} \rangle_2 + U_{2,i} \langle \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j} \rangle_2 \\
 &= \langle \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}u''_{2,i} \rangle_2 + U_{2,i}E_{QB}
 \end{aligned} \tag{3.74}$$

En reportant ce résultat dans l'équation (3.73), il vient :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2E_{QB} + \frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2E_{QB}U_{2,i} &= -\frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2 \langle \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}u''_{2,i} \rangle_2 + \mathbb{C}(\frac{1}{2}m_2u''_{2,j}u''_{2,j}) \\
 &+ \alpha_2\rho_2 \langle \frac{dd_2}{dt} \frac{3}{2d_2}u''_{2,j}u''_{2,j} \rangle_2 \\
 &+ \alpha_2\rho_2 \langle \frac{du_{2,i}}{dt} \frac{\partial}{\partial u_{2,i}} \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j} \rangle_2
 \end{aligned} \tag{3.75}$$

Le dernier terme peut être simplifié :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial u_{2,i}} \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j} &= u''_{2,j} \frac{\partial}{\partial u_{2,i}} u''_{2,j} \\
 &= u''_{2,j} \frac{\partial}{\partial u_{2,i}} (u_{2,j} - U_{2,j}) \\
 &= u''_{2,i}
 \end{aligned} \tag{3.76}$$

En injectant ce résultat dans l'équation (3.73), il vient :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2E_{QB} + \frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2E_{QB}U_{2,i} &= -\frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2 \langle \frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}u''_{2,i} \rangle_2 + \mathbb{C}(\frac{1}{2}m_2u''_{2,j}u''_{2,j}) \\
 &+ \alpha_2\rho_2 \langle \frac{dd_2}{dt} \frac{3}{2d_2}u''_{2,j}u''_{2,j} \rangle_2 \\
 &+ \alpha_2\rho_2 \langle u''_{2,i} \frac{du_{2,i}}{dt} \rangle_2 \\
 &= -\frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2 \langle u''_{2,j}u''_{2,j}u''_{2,i} \rangle_2 + \mathbb{C}(\frac{1}{2}m_2u''_{2,j}u''_{2,j}) \\
 &+ \alpha_2\rho_2 \langle u''_{2,i} \frac{F_{2,i}}{m_2} \rangle_2 \\
 &+ \alpha_2\rho_2 \langle \frac{dd_2}{dt} \frac{3}{2d_2}u''_{2,j}u''_{2,j} \rangle_2
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

En utilisant la relation (3.58), on obtient finalement :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 E_{QB} + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 E_{QB} U_{2,i} = & - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,j} u''_{2,j} u''_{2,i} \rangle_2}_{\mathbb{T}(\frac{1}{2} u''_{2,j} u''_{2,j})} + \mathbb{C}(\frac{1}{2} m_2 u''_{2,j} u''_{2,j}) \\
 & + \underbrace{\alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,i} \frac{F_{2,i}}{m_2} \rangle_2}_{W_{QB}} \\
 & + \underbrace{n_2 \left\{ \frac{1}{2} u''_{2,j} u''_{2,j} \frac{dm_2}{dt} \right\}_2}_{\Gamma_{QB}}
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

$\mathbb{T}(u''_{2,j} u''_{2,j})$ représente le transport d'énergie quasi-brownienne par la vitesse décorrélé, $\mathbb{C}(\frac{1}{2} m_2 u''_{2,j} u''_{2,j})$ les échanges d'énergie quasi-brownienne par interactions entre particules (collision, atomisation, coalescence), W_{QB} le travail des forces extérieures associé au mouvement décorrélé et Γ_{QB} la variation d'énergie cinétique due aux variations de masse des particules. Ces termes sont à modéliser.

3.2.6 Température et enthalpie

En choisissant $\Psi(\vec{u}_2, \theta_2, d_2) = \theta_2$ dans l'équation (3.49), l'équation de transport moyen de la température moyenne des particules T_2 s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 \langle u_{2,i} \theta_2 \rangle_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle \theta_2 \rangle_2 = & \mathbb{C}(m_2 \theta_2) + \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{d\theta_2}{dt} \frac{\partial \theta_2}{\partial \theta_2} \rangle_2 \\
 & + \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{dd_2}{dt} \frac{3}{d_2} \theta_2 \rangle_2 \\
 = & \mathbb{C}(m_2 \theta_2) + \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{d\theta_2}{dt} \rangle_2 \\
 & + \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{dd_2}{dt} \frac{3}{d_2} \theta_2 \rangle_2
 \end{aligned} \tag{3.79}$$

En décomposant θ_2 et $u_{2,i}$ en partie moyenne et décorrélée selon les équations (3.27) et (3.28) et en utilisant la relation (3.58), l'équation précédente s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_2 \rho_2 T_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 T_2 U_{2,i} = & - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle \theta''_{2,i} u''_{2,i} \rangle_2}_{\mathbb{T}(\theta''_{2,i})} + \mathbb{C}(m_2 \theta_2) \\
 & + \alpha_2 \rho_2 \langle \frac{d\theta_2}{dt} \rangle_2 + n_2 \left\{ \theta_2 \frac{dm_2}{dt} \right\}_2
 \end{aligned} \tag{3.80}$$

On voit apparaître le terme $\mathbb{T}(\theta''_2)$ qui représente le transport de température décorrélée par la vitesse décorrélée. C'est un flux doublement décorrélé. $\mathbb{C}(m_2\theta_2)$ représente les échanges de température dus aux interactions entre particules (coalescence avec températures de particules différentes par exemple). Les deux termes restants vont être interprétés grâce à l'équation bilan de l'enthalpie.

D'après l'équation (3.30), l'équation de transport de T_2 et l'équation de transport de H_2 sont proportionnelles au facteur $C_{p,2}$ près, d'où, en multipliant l'équation ci-dessus par la capacité calorifique des particules, l'équation de transport de l'enthalpie mésoscopique massique des particules H_2 s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2H_2 + \frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2H_2U_{2,i} &= \mathbb{T}(h''_2) + \mathbb{C}(m_2h_2) \\ &+ \underbrace{\alpha_2\rho_2 \left\langle \frac{dh_2}{dt} \right\rangle_2}_{\Pi_2} + n_2 \underbrace{\left\{ h_2 \frac{dm_2}{dt} \right\}_2}_{\Gamma_h} \end{aligned} \quad (3.81)$$

$\mathbb{T}(h''_2)$ représente le transport d'enthalpie décorrélée par la vitesse décorrélée, $\mathbb{C}(m_2h_2)$ les échanges d'enthalpie dus aux interactions entre particules. Le terme Π_2 représente les échanges d'enthalpie avec la phase continue (évaporation, condensation principalement). Γ_h représente la variation d'enthalpie due aux variations de masse des particules.

3.3 Résumé des équations de la phase dispersée

En l'absence de collisions, ces équations s'écrivent :

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}n_2}_{\text{advection}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}n_2U_{2,i}}_{\text{convection}} &= \mathbb{T}\left(\frac{1}{m_2}\right) \\ \frac{\partial}{\partial t}\Sigma_2 + \frac{\partial}{\partial x_i}\Sigma_2U_{2,i} &= \mathbb{T}(\sigma_2) + \Gamma_s \\ \frac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2 + \frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2U_{2,i} &= \Gamma_2 \\ \frac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2U_{2,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\alpha_2\rho_2U_{2,i}U_{2,j} &= \mathbb{T}(u''_{2,i}) + \Gamma_{u,i} + \mathbf{F}_{d,i} \\ \frac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2E_{QB} + \frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2E_{QB}U_{2,i} &= \mathbb{T}\left(\frac{1}{2}u''_{2,j}u''_{2,j}\right) + \Gamma_{QB} + W_{QB} \\ \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2H_2}_{\text{advection}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}\alpha_2\rho_2H_2U_{2,i}}_{\text{convection}} &= \underbrace{\mathbb{T}(h''_2)}_{\text{mvt décorrélé}} + \underbrace{\Gamma_2h_2}_{\text{évaporation}} + \underbrace{\Pi_2}_{\text{autres variations}} \end{aligned} \quad (3.82)$$

Les modèles de fermeture sont présentés et développés au chapitre 4.

3.4 Résumé des hypothèses sur la phase dispersée

- H1 - Les inclusions sont supposées indéformables et sphériques.
- H2 - La densité des particules est bien plus grande que celle du gaz. En conséquence, les termes de masse ajoutée sont négligeables.
- H3 - Le diamètre des particules est faible ($d_2 \ll 1$). En conséquence, les effets d'histoire sont négligeables.
- H4 - Les particules sont assez petites pour que l'effet de la portance de Saffman soit négligeable devant la traînée [35].
- H5 - La gravité est négligeable devant la traînée.
- H6 - Les quatre hypothèses ci-dessus impliquent que le seul effort extérieur auquel est soumise une particule se réduit à la traînée.
- H7 - La taille des particules est petite devant l'échelle intégrale de turbulence.
- H8 - L'écoulement est supposé dilué ($\alpha_2 < 0.1$) : les interactions particule-particule (atomisation, coalescence) sont donc négligeables.
- H9 - La température d'une particule est homogène (conduction infinie à l'intérieur de la particule).
- H10 - En un point, toutes les particules d'un même nuage statistique ont la même température.
- H11 - En un point, toutes les particules de même diamètre d'un nuage statistique suivent une répartition gaussienne de leur vitesse autour d'une valeur moyenne qui dépend de leur diamètre.
- H12 - Les termes sous-maille de la LES ne sont pas modélisés pour la phase dispersée. La résolution de la phase liquide est de type DNS.

3.5 Equations bilan de la phase continue

Les écoulements présents dans les turbines à gaz sont très majoritairement turbulents. Les équations bilan de la phase gazeuse sont donc directement présentées dans l'approche Simulation des Grandes Echelles (SGE) ou selon la terminologie anglophone 'Large Eddy Simulation' (LES).

L'objectif principal de la LES est de calculer de manière explicite les grosses structures de l'écoulement tandis que les structures plus petites sont modélisées (Moin [40], Sagaut [61]...). Ainsi, le caractère instationnaire est pris en compte, ce qui constitue un atout majeur vis-à-vis des modélisations RANS qui ne traitent que l'écoulement moyen. C'est à l'aide d'une opération de filtrage que les grandes échelles sont distinguées des plus petites.

3.5.1 Filtrage LES

Dans l'approche LES, les quantités étudiées notées Q sont filtrées dans l'espace physique à l'aide d'un opérateur de moyenne pondéré par une fonction de filtre sur un volume donné.

Il existe également un second filtre (qui ne sera pas traité dans cette étude) défini dans le contexte d'une analyse spectrale et qui a pour but de supprimer toutes les composantes supérieures à une fréquence donnée.

L'opération de filtrage [1] dans l'espace physique est donnée par la définition suivante :

$$\bar{Q}(\vec{x}) = \int_D Q(\vec{x}') \bar{F}(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \quad (3.83)$$

où \bar{F} est le filtre LES.

Les filtres standards investis dans l'espace physique sont de type boîte (3.84) ou Gaussien (3.85). $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ est le vecteur coordonnées et Δ est la longueur de la boîte.

$$\bar{F}(\mathbf{x}) = \bar{F}(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} 1/\Delta^3, & \text{si } x_i \leq \Delta/2, i = 1, 2, 3. \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.84)$$

$$\bar{F}(\mathbf{x}) = \bar{F}(x_1, x_2, x_3) = \left(\frac{6}{\pi\Delta^2} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{6}{\pi\Delta^2} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \right] \quad (3.85)$$

Dans le code compressible AVBP_TPF, la taille du filtre est implicitement définie par la discrétisation du maillage.

Dans les écoulements à densité variable, on préfère généralement utiliser la moyenne de Favre [18] :

$$\tilde{Q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\bar{\rho}_1} \int_D \rho_1 Q(\mathbf{x}') \bar{F}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (3.86)$$

\tilde{Q} et $\bar{\rho}_1$ représentent des quantités filtrées. Dans les écoulements réactifs, la moyenne de Favre est généralement introduite de la façon suivante :

$$\tilde{Q}(x) = \frac{\overline{\rho_1 Q(x)}}{\bar{\rho}_1(x)} \quad (3.87)$$

Chaque quantité Q peut être décomposée en une composante filtrée \tilde{Q} (resp. \bar{Q}) et une composante résiduelle ou 'sous-maille' Q'' (resp. Q') telles que, $Q(x) = \bar{Q}(x) + Q'(x) = \tilde{Q}(x) + Q''(x)$.

Contrairement aux simulations RANS, le filtrage LES implique les relations suivantes (3.88 & 3.89) :

$$\tilde{\tilde{Q}} \neq \tilde{Q} ; \tilde{Q}'' \neq 0 \quad (3.88)$$

$$\bar{\bar{Q}} \neq \bar{Q} ; \bar{Q}' \neq 0 \quad (3.89)$$

avec,

$$\tilde{\tilde{Q}}'' = \frac{\overline{\rho_1 Q''}}{\bar{\rho}_1} = \frac{\overline{\rho_1(Q - \tilde{Q})}}{\bar{\rho}_1} = \frac{\bar{\rho}_1 \tilde{Q} - \overline{\rho_1 \tilde{Q}}}{\bar{\rho}_1} = \frac{\bar{\rho}_1 \tilde{Q} - \bar{\rho}_1 \tilde{Q}}{\bar{\rho}_1} \quad (3.90)$$

Précisons enfin que le filtrage des équations nécessite une hypothèse de permutableté entre l'opérateur de dérivation et le filtre. Ces définitions mènent à un ensemble d'équations similaires aux équations moyennées de Reynolds qui sont présentées dans le paragraphe suivant.

3.5.2 Fluide newtonien et gaz parfait

On définit les variables caractéristiques du système étudié : p_1, ρ_1, \vec{u}_1 et T_1 respectivement la masse volumique, la vitesse et la température de la phase continue. Le fluide porteur est supposé Newtonien, c'est-à-dire que le tenseur visqueux $\tau_{1,ij}$ suit la loi de Newton :

$$\tau_{1,ij} = \mu_1 \left(\frac{\partial u_{1,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{1,j}}{\partial x_i} \right) - 2/3 \mu_1 \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.91)$$

avec δ_{ij} le symbole de Kronecker et μ_1 la viscosité dynamique qui suit la loi de Sutherland :

$$\mu_1 = c_3 \frac{T_1^{3/2}}{T_1 + c_4} \quad (3.92)$$

avec pour l'air $c_3 = 2.7238 \times 10^{-5}$ et $c_4 = -0.0665$.

On donne également le tenseur total des contraintes σ_{ij} défini selon :

$$\sigma_{ij} = -p_1 \delta_{ij} + \mu_1 \left(\frac{\partial u_{1,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{1,j}}{\partial x_i} \right) - 2/3 \mu_1 \frac{\partial u_{1,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.93)$$

La phase continue est définie comme un gaz parfait dont la température et la pression suivent la loi d'état suivante :

$$p_1 = \rho_1 \bar{r} T_1 \quad (3.94)$$

où $\bar{r} = R/\bar{W}$ est la constante du mélange variant en temps et en espace et \bar{W} est la masse moléculaire moyenne du mélange.

$$\frac{1}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (3.95)$$

avec W_k et Y_k respectivement la masse moléculaire et la fraction massique de l'espèce k , k variant de 1 à N , le nombre total d'espèces du mélange.

La constante du mélange \bar{r} et les chaleurs spécifiques C_p et C_v sont alors définies selon les espèces constitutives :

$$\bar{r} = \frac{R}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (3.96)$$

$$\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \text{ et } \bar{C}_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (3.97)$$

avec \mathcal{R} la constante universelle égale à 8.3143 J/mol/K .

L'exposant adiabatique pour le mélange est donné par $\bar{\gamma} = \bar{C}_p/\bar{C}_v$.

3.5.3 Equation de conservation de la masse

Dans le cas d'un mélange de plusieurs espèces Y_k l'équation de conservation de la masse avec correction sur la vitesse s'écrit :

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u_{1,j}}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_1 \rho_1 \sum_{k=1}^N Y_k V_i^k \right) = \Gamma_1 \delta_{kk_{evap}} \quad (3.98)$$

$\Gamma_1 = -\Gamma_2$ représente la variation de masse de l'espèce k si celle-ci est identique à l'espèce constitutive des particules k_{evap} et V^k le vecteur de diffusion des espèces tel que $\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0$

On exprime généralement cette relation par la loi de Fick sous la forme d'un gradient d'espèces :

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \text{ avec } X_k = Y_k \frac{\bar{W}}{W_k} \quad (3.99)$$

avec D_k la diffusivité moléculaire qui exprime le rapport du transport de quantité de mouvement avec le transport de masse pour l'espèce k . D_k est calculé par la relation

(3.100). Les coefficients D_{ij} sont des fonctions complexes d'intégrales de collision et des variables thermodynamiques.

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^N X_j / D_{jk}} \quad (3.100)$$

Cependant, une forme approchée de D_k est donnée par la relation, $D_k = \mu_1 / \rho_1 S_{c,k}$ où $S_{c,k}$ est le Schmidt de l'espèce k et est supposé constant pour toutes les espèces ($S_{c,k} = 0.7$). Les équations (3.98) & (3.99) amènent à l'expression suivante :

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (3.101)$$

Cette équation vérifie (3.98) si tous les coefficients de diffusion D_k sont égaux à D sans quoi l'équation de masse n'est pas conservée. Afin d'assurer la conservation de la masse, une vitesse de correction \vec{V}^c est apportée et est ajoutée à la vitesse de convection.

$$V_i^c = -D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (3.102)$$

3.5.4 Equation de conservation de la quantité de mouvement

En prenant en compte le couplage avec la traînée et la quantité de mouvement apportée par le liquide évaporé, cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u_{1,i}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u_{1,i} u_{1,j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial p_1}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{1,ij}}{\partial x_j} - \mathbf{F}_{d,i} + U_{2,i} \Gamma_1 \quad (3.103)$$

3.5.5 Equation de conservation des espèces

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_1 \rho_1 (u_{1,i} + V_i^c) Y_k = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_1 \rho_1 D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) \quad (3.104)$$

Comme pour l'équation de la conservation de la masse, la vitesse de correction \vec{V}^c est ajouté à la vitesse de convection pour assurer la conservation. La vitesse de diffusion est la même pour toutes les espèces.

Le flux diffusif laminaire J_i^k de l'espèce k est alors classiquement exprimé par :

$$J_i^k = -\alpha_1 \rho_1 \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + Y_k V_i^c \right) \quad (3.105)$$

Des expressions plus complexes sont parfois utilisées pour décrire la diffusion moléculaire des espèces. L'effet Soret (diffusion des espèces due aux gradients de températures) et le transport moléculaire dû aux gradients de pressions sont généralement négligés.

3.5.6 Equation de conservation de l'énergie

On définit l'énergie totale du gaz e_t selon :

$$e_t = \sum_{k=1}^N \int_{T_0}^T C_{v,k} dT + \frac{1}{2} \|\vec{u}_1\|^2. \quad (3.106)$$

avec T_0 température de référence choisie arbitrairement.

Cette énergie suit l'équation :

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_t}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u_{1,i} e_t}{\partial x_i} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_{1,i}) + \dot{Q} + \alpha_1 \rho_1 \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_{1,i} + V_{k,i}) \quad (3.107)$$

\dot{Q} est le flux radiatif et généralement négligé. $\alpha_1 \rho_1 \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_{1,i} + V_{k,i})$ correspond aux travail des forces volumiques de l'espèce k .

Le flux d'énergie q_i implique un terme de diffusion de la chaleur exprimé selon la loi de Fourier ($\lambda \partial T / \partial x_i$) et un terme de diffusion des espèces :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \alpha_1 \rho_1 \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{\partial W_k}{\partial \bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + Y_k V_i^c \right) h_{s,k} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_i^k h_{s,k} \quad (3.108)$$

où $\lambda = \mu_1 \bar{C}_p / Pr$ est la conductivité thermique et où le nombre de Pr est supposé être constant et égal à 0.7. $h_{s,k}$ est l'enthalpie sensible de l'espèce k et est donnée par la relation, $h_{s,k} = \int_{T_0}^T C_{p,k} dT$.

Il faut noter que pour des écoulements à haut nombre de Reynolds, les flux diffusifs laminaires des espèces J_j^k et de la chaleur q_i sont généralement petits devant le transport turbulent.

3.5.7 Les équations filtrées

Le jeu d'équations (3.109) présente les équations filtrées de masse, de quantité de mouvement, de transport des espèces et d'énergie pour des écoulements non réactifs. Les flux incompressibles (F^I), visqueux (F^V) et turbulents (F^t) sont mis en évidences et les notations $-$ et \sim dénotent les quantités filtrées. Comme les termes sous-mailles de la phase dispersée ne sont pas modélisés, les quantités filtrées

présentant le symbole \sim ou $\widetilde{}$ sont sans ambiguïté et ne nécessitent pas l'indice 1.

$$\begin{array}{ccccccc}
 \frac{\partial \bar{\rho}_1}{\partial t} & + & \frac{\partial \bar{\rho}_1 \widetilde{u}_i}{\partial x_i} & = & 0 & & \\
 \frac{\partial \bar{\rho}_1 \widetilde{u}_i}{\partial t} & + & \frac{\partial \bar{\rho}_1 \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} & = & \frac{\partial \widetilde{\tau}_{1,ij}}{\partial x_j} & + & \frac{\partial \widetilde{\tau}_{1,ij}^t}{\partial x_j} \\
 \frac{\partial \bar{\rho}_1 \widetilde{Y}_k}{\partial t} & + & \frac{\partial \bar{\rho}_1 \widetilde{u}_j \widetilde{Y}_k}{\partial x_i} & = & - \frac{\partial \widetilde{J}_{i,k}}{\partial x_i} & - & \frac{\partial \widetilde{J}_{i,k}^t}{\partial x_i} \\
 \frac{\partial \bar{\rho}_1 \widetilde{e}_t}{\partial t} & + & \frac{\partial (\bar{\rho}_1 \widetilde{e}_t + \bar{p}) \widetilde{u}_i}{\partial x_i} & = & - \frac{\partial \widetilde{q}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i \widetilde{\tau}_{1,ij}}{\partial x_j} & - & \frac{\partial \widetilde{q}_i^t}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i \widetilde{\tau}_{1,ij}^t}{\partial x_j} \\
 \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{Termes}} & & \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{Termes}} & & \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{Termes}} & & \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{Termes}} \\
 \text{instationnaires} & & \text{non visqueux } (F^I) & & \text{visqueux } (F^V) & & \text{turbulents } (F^t)
 \end{array} \tag{3.109}$$

Dans les équations filtrées, on retrouve les différents termes visqueux qui sont le tenseur filtré des vitesses les flux de diffusion des espèces et de la chaleur ((3.110)-(3.112)) filtrés.

$$\widetilde{\tau}_{1,ij} = 2\bar{\mu}_1(\widetilde{S}_{ij} - 1/3\widetilde{S}_{ll}\delta_{ij}) \quad \text{avec} \quad \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \tag{3.110}$$

$$\widetilde{J}_k = - \left(\frac{\bar{\mu}_1}{S_{c,k}} \frac{W_k}{\bar{W}} \nabla \widetilde{X}_k + \bar{\rho}_k \widetilde{V}^c \right) \quad \text{avec} \quad \widetilde{V}^c = - \sum_{k=1}^N \frac{\bar{\mu}_1}{\bar{\rho}_1 S_{c,k}} \frac{W_k}{\bar{W}} \nabla \widetilde{X}_k \tag{3.111}$$

$$\widetilde{q} = - \frac{\bar{\mu}_1 \bar{C}_p}{Pr} \nabla \widetilde{T} + \sum_{k=1}^N \widetilde{J}_k \widetilde{h}_{s,k} \tag{3.112}$$

Le filtrage LES fait apparaître des corrélations d'ordre deux, $\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j$, $\widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k$ et $\widetilde{u}_i \widetilde{e}$ qui sont à modéliser pour clore le système. Ces inconnues sont :

- le tenseur des contraintes de Reynolds : $\widetilde{\tau}_{1,ij}^t = \bar{\rho}_1(\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j)$,
- le flux de sous-maille des espèces : $\widetilde{J}_{i,k}^t = \bar{\rho}_1(\widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k)$,
- le flux de sous-maille de chaleur : $\widetilde{q}_i^t = \bar{\rho}_1(\widetilde{u}_i \widetilde{e} - \widetilde{u}_i \widetilde{e})$ où e est l'énergie sensible.

3.5.8 Les modèles de sous-maille

Concept de viscosité de sous-maille

Dans le concept de viscosité de sous-maille une hypothèse essentielle est à considérer : le mécanisme de transfert d'énergie des échelles résolues vers les échelles de sous-maille est analogue au mécanisme moléculaire représenté par le terme de diffusion pour lequel une viscosité moléculaire apparaît.

L'action primordiale des petits tourbillons est d'absorber de l'énergie pour la dissiper. Lorsque ces petites échelles sont absentes, il faut renforcer de façon directe la dissipation en augmentant la valeur de la viscosité de manière à conserver une dissipation énergétique suffisante.

En LES, les échelles plus petites que la taille de la maille ne sont pas résolues mais prises en compte à travers le tenseur de sous-maille $\tilde{\tau}_{1,ij}^t$. Dans la formulation mathématique de Boussinesq, $\tilde{\tau}_{1,ij}^t$ est basé sur une hypothèse de viscosité turbulente de sous-maille notée ν_{SGS} , la notation 'SGS' signifiant dans la littérature anglophone Sub-Grid Scale.

$\tilde{\tau}_{1,ij}^t$ est classiquement modélisé selon Smagorinsky [69] :

$$\tilde{\tau}_{1,ij}^t - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tilde{\tau}_{1,ll} = 2 \nu_{SGS}\tilde{S}_{ij} \quad (3.113)$$

avec

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, i, j = 1, 3 \quad (3.114)$$

\tilde{S}_{ij} correspond au taux de déformation local basé sur les vitesses résolues.

Les flux turbulents des espèces $\tilde{J}_{i,k}^t$ et enthalpique \tilde{q}_i^t sont modélisés de manière analogue et leur expression est donnée dans les équations (3.115) & (3.116) :

$$\tilde{J}_{i,k}^t = -\bar{\rho}_1(\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = - \left(\frac{\mu_{SGS}}{S_{c,k}^t} \frac{W_k}{\bar{W}} \nabla \tilde{X}_k + \bar{\rho}_k \tilde{V}^{c,t} \right) \quad (3.115)$$

$$\tilde{q}^t = -\bar{\rho}_1(\widetilde{u_i e} - \tilde{u}_i \tilde{e}) = \frac{\gamma}{Pr^t} \mu_{SGS} \frac{\bar{C}_p}{\gamma} \nabla \tilde{T} \quad (3.116)$$

avec

$$\tilde{V}^c = - \sum_{k=1}^N \frac{\bar{\mu}_1}{\bar{\rho}_1 S_{c,k}^t} \frac{W_k}{\bar{W}} \nabla \tilde{X}_k \quad (3.117)$$

où $S_{c,k}^t$ le nombre de Schmidt turbulent de l'espèce k pris égal à 0.71 et $\mu_{SGS} = \rho_1 \nu_{SGS}$.

La conductivité thermique turbulente λ_t du mélange du gaz est définie par $\lambda_t = \nu_{SGS}/Pr^t$. Le nombre de Prandtl turbulent, Pr^t , est fixé 0.9.

Modélisation de ν_{SGS} : le modèle WALE

De nombreux travaux ont été réalisés sur la modélisation de ν_{SGS} (Sagaut [61], Lesieur [34], Ferziger [20]). Les modèles les plus rencontrés et les plus faciles à implémenter dans un code de calcul se basent sur une utilisation des échelles résolues.

Les deux idées principales du modèle WALE [44] (Wall Adapting Local Eddy-viscosity) sont les suivantes :

- la viscosité de sous-maille ν_{SGS} est reliée à la fois au taux de déformation et au taux de rotation des structures turbulentes.
- ν_{SGS} tend naturellement vers zéro près de la paroi.

Un atout essentiel de ce modèle est l'absence d'ajustement de constante (dynamique ou fonction d'amortissement) [44]. De plus, dans le cas d'un cisaillement pur, la viscosité turbulente est nulle et permet de reproduire la transition laminaire-turbulent à travers l'accroissement des modes linéaires instables.

Les échelles de sous-mailles sont déterminées pour tous les nœuds du maillage et à chaque instant à partir des caractéristiques des échelles résolues. L'approche filtrée est basée sur le volume de la cellule V_{cell} avec une taille de filtre $\Delta = V_{cell}^{1/3}$ et cette grandeur sert de longueur caractéristique pour l'expression de ν_{SGS} qui est donnée par la relation suivante :

$$\nu_{SGS} = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (3.118)$$

où

$$s_{ij}^d = \tilde{S}_{ik} \tilde{S}_{kj} + \tilde{\Omega}_{ik} \tilde{\Omega}_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} [\tilde{S}_{mn} \tilde{S}_{mn} - \tilde{\Omega}_{mn} \tilde{\Omega}_{mn}] \quad (3.119)$$

avec $\tilde{\Omega}_{ij}$ taux de rotation du champ filtré :

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.120)$$

La constante du modèle C_w vaut 0.55 et donne sensiblement la même dissipation d'énergie cinétique de sous-maille que pour le modèle de Smagorinsky [69].

Son efficacité a été montrée dans plusieurs travaux (Légier [32], Faivre [17]). Son utilisation semble adaptée pour des études LES sur des géométries complexes dans la mesure où :

- les structures cohérentes sont bien résolues, ce qui va permettre d'obtenir des valeurs précises des taux de déformations et donc une valeur précise de la viscosité sous-maille.
- les tailles de maille à la paroi sont relativement faibles, ce qui va permettre de ne pas surestimer la dissipation dans ces régions.

Chapitre 4

Fermetures

Les termes suivants identifiés au chapitre précédent nécessitent d'être fermés :

- flux décorrélé de densité de particules : $\mathbb{T}(\frac{1}{m_2}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} n_2 \{u''_{2,i}\}_2$ (*cf* Eq. (3.55))
- flux décorrélé de densité de surface : $\mathbb{T}(\frac{\sigma_2}{m_2}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} n_2 \{u''_{2,i}\}_2$ (*cf* Eq. (3.66))
- flux décorrélé de QDM : $\mathbb{T}(u''_{2,j}) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,i} u''_{2,j} \rangle_2$ (*cf* Eq. (3.71))
- flux décorrélé d'EQB : $\mathbb{T}(\frac{1}{2} u''_{2,j} u''_{2,j}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,j} u''_{2,j} u''_{2,i} \rangle_2$ (*cf* Eq. (3.78))
- efforts extérieurs moyen : $\langle \frac{\mathbf{F}_i}{m_2} \rangle_2$ (*cf* Eq. (3.71))
- variations dues à l'évaporation : $\Gamma_2, \Gamma_s, \Gamma_{\bar{u}}$ et Γ_{QB} (*cf* Eqs. (3.60), (3.66), (3.71), et (3.78)).

Une modélisation de ces termes est proposée en utilisant des hypothèses simplificatrices sur le comportement d'une particule puis en intégrant ces hypothèses sur l'ensemble du nuage statistique.

Malgré des différences d'approches (eulérien ou lagrangien stochastique), l'utilisation de PDF, et donc de moments, implique souvent des fermetures étonnamment similaires, en tout cas sur les premières étapes [83 ; 84 ; 85 ; 86].

La toute première simplification visant à faciliter le calcul des intégrales consiste à décomposer la PDF $f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t)$ en quatre facteurs distincts $n_2, N_d(\beta_p; \vec{x}, t), G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t)$ et $G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t)$ [85] tels que :

$$f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t) = n_2 N_d(\beta_p; \vec{x}, t) G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t) G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t) \quad (4.1)$$

Les choix des trois PDFs vont être explicités dans les sections suivantes.

4.1 Pdf présumées

PDF présumée de diamètre

Il existe de nombreuses formes de PDF présumées empiriques pour représenter la répartition des diamètres d'un nuage polydisperse.

Les plus courantes sont répertoriées ci-dessous. Afin de respecter les notations de Babinsky [3] utilisées sur les graphiques, la PDF de diamètre correspondant à N_d dans ce travail est notée de façon générique f . F est la fonction de non dépassement associée à f et \bar{D} un diamètre caractéristique de la répartition.

- la distribution de Rosin-Ramler [60] est la plus ancienne :

$$f(d_2) = q \bar{D}^{-q} d_2^{q-1} \exp(-(d_2/\bar{D})^q) \quad (4.2)$$

où q est un paramètre sans dimension d'écart au diamètre caractéristique \bar{D} . C'est une loi très utilisée en raison de sa simplicité car cette PDF correspond à une répartition cumulée de la forme :

$$F(d_2) = 1 - \exp(-(d_2/\bar{D})^q) \quad (4.3)$$

Une illustration de l'influence des deux paramètres est proposée à la Fig. 4.1.

- la loi log-normale a été proposée par Kolmogorov [10] qui s'intéressait à la distribution d'un ensemble de particules solides lors d'un broyage continu :

$$f(d_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \ln(\sigma_{LN}) d_2} \exp^{-\frac{1}{2} \left[\ln \left(\frac{d_2}{\bar{D}} \right)^2 / \ln(\sigma_{LN})^2 \right]} \quad (4.4)$$

où σ_{LN} est un paramètre sans dimension d'écart au diamètre caractéristique \bar{D} . Ce type de distribution est équivalent à une répartition gaussienne dont la variable serait le logarithme du diamètre. Une illustration de l'influence des deux paramètres est proposée à la Fig. 4.2.

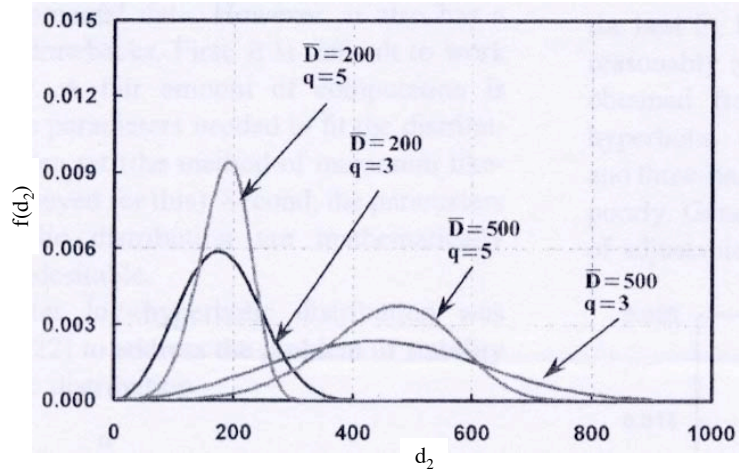


FIG. 4.1 – Valeurs typiques de la loi Rosin-Ramler, Babinsky [3].
 d_2 en μm et $f(d_2)$ en μm^{-1} .

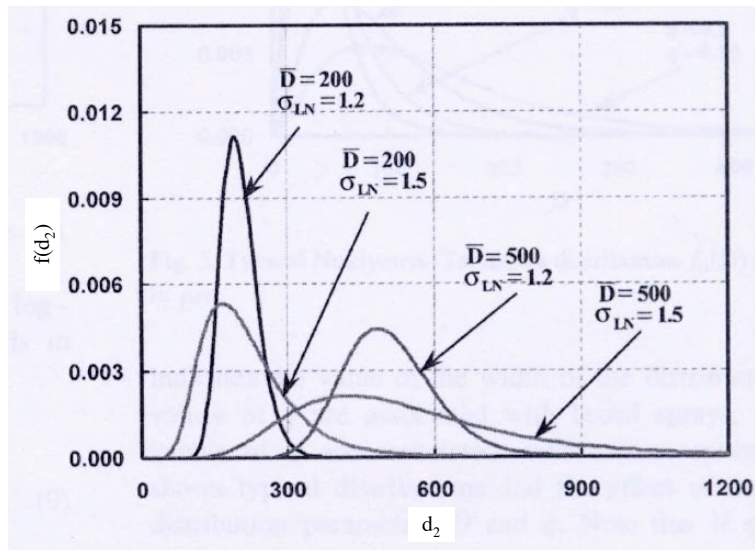


FIG. 4.2 – Valeurs typiques de la loi log-normale, Babinsky [3].
 d_2 en μm et $f(d_2)$ en μm^{-1} .

- la loi 'upper-limit' (limite supérieure) est une modification de la loi log-normale introduite par Mugele et Evans [41] pour prendre en compte un diamètre maximal D_{max} :

$$f(d_2) = \frac{\delta D_{max}}{\sqrt{\pi} d_2 (D_{max} - d_2)} \exp \left[-\delta^2 \left[\ln \left(\frac{d_2 / \bar{D}}{1 - d_2 / D_{max}} \right)^2 \right] \right] \quad (4.5)$$

où $\delta = \frac{1}{\sqrt{2} \ln(\sigma_{UL})}$ et σ_{UL} est un paramètre sans dimension d'écart au diamètre caractéristique \bar{D} . Une illustration de l'influence des trois paramètres (\bar{D} , D_{max} et σ_{UL}) est proposée à la Fig. 4.3.

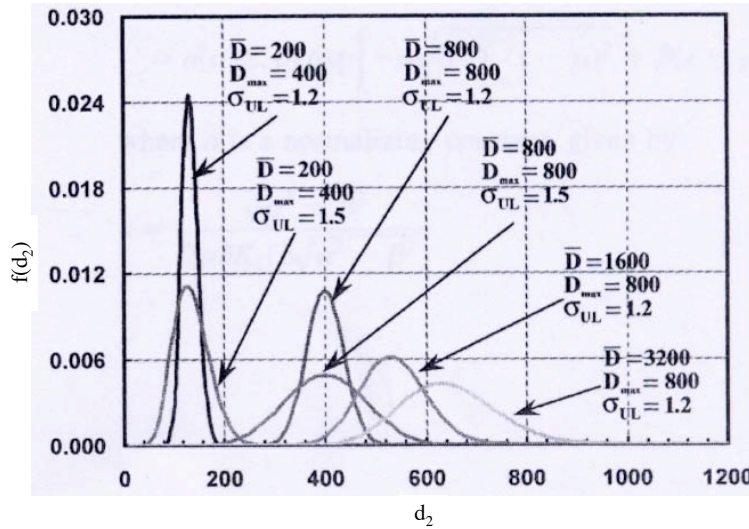


FIG. 4.3 – Valeurs typiques de la loi 'upper limit', Babinsky [3].
 d_2 en μm et $f(d_2)$ en μm^{-1} .

- la loi 'root-normal' (racine carré - normale) proposée par Tate et Marshall [72] pour décrire la distribution des gouttes dans les sprays :

$$f(d_2) = \frac{1}{2\sigma_{RN}\sqrt{2\pi}d_2} \exp \left[-\frac{1}{2} \left[\frac{\sqrt{d_2} - \sqrt{\bar{D}}}{\sigma_{RN}} \right]^2 \right] \quad (4.6)$$

où σ_{RN} est un paramètre sans dimension d'écart au diamètre caractéristique \bar{D} . Une illustration de l'influence des deux paramètres (\bar{D} et σ_{RN}) est proposée à la Fig. 4.4.

- la loi de Nukiyama-Tanasawa nommée d'après ses auteurs [45] :

$$f(d_2) = a d_2^b \exp(-b d_2^a) \quad (4.7)$$

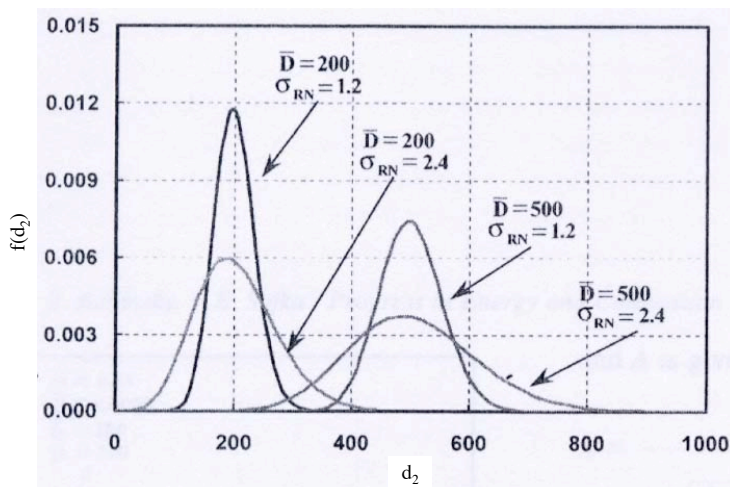


FIG. 4.4 – Valeurs typiques de la loi 'root-normal', Babinsky [3].
 d_2 en μm et $f(d_2)$ en μm^{-1} .

où b , p et q sont des paramètres ajustables et a une constante de normalisation. La largeur de la distribution et l'emplacement du diamètre moyen est contrôlé par ces trois paramètres. D'après Paloposki [48], cette distribution ne produit des résultats physiques que si $p > 1$ et $q > 0$ ou $p < -4$ et $q < 0$. Le paramètre p est souvent fixé à 2 [3]. Une illustration de l'influence des deux paramètres (b et q) est proposée à la Fig. 4.5 en prenant $p = 2$.

Il existe également d'autres lois possédant plus de degrés de liberté telles que les lois log-hyperbolique ou log-hyperbolique à trois paramètres mais leur complexité pour le traitement analytique comme pour l'évaluation numérique les rend délicates à utiliser. Si l'on ajoute le fait que, selon les paramètres choisis, la loi obtenue conduit à des comportements instables [3], on comprend que leur utilisation soit peu diffusée.

Devant tant de formes présumées possibles, il est légitime de se demander si l'une de ces lois prévaut sur les autres. Paloposki [48] a essayé de répondre à cette question en évaluant l'écart entre ces lois et 22 distributions expérimentales. La loi est calée au mieux sur la distribution expérimentale et un critère d'écart (χ_2) donne la précision de la loi. Les plus précises sont les lois Nukiyama-Tanasawa et log-hyperbolique. Les lois log-normale et 'upper-limit' produisent des résultats raisonnablement précis et la distribution de Rosin-Ramler et log-hyperbolique à trois paramètres sont peu efficaces à décrire la réalité expérimentale.

Dans ce travail, la répartition de diamètre N_d en un point est choisie log-normale. Comme indiqué au paragraphe précédent, il existe des lois plus précises (et aussi

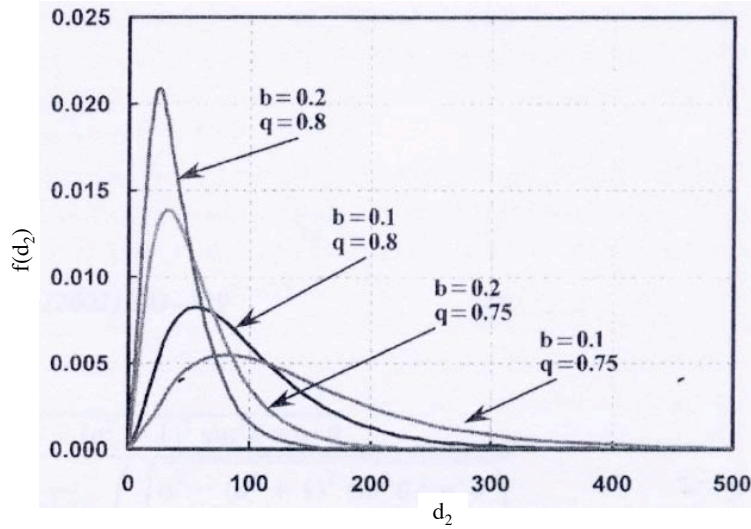


FIG. 4.5 – Valeurs typiques de la loi Nukiyama-Tanasawa, Babinsky [3].
 d_2 en μm et $f(d_2)$ en μm^{-1} .

plus coûteuses). Néanmoins, afin de limiter les résolutions numériques, le choix a été fait de pousser le plus loin possible le développement analytique, ce qui nécessite des propriétés d'intégration symbolique que seule la loi log-normale offre. De plus, elle permet avec seulement deux paramètres de simuler des distributions variées obtenues couramment en aval d'injecteurs de turbines à gaz.

La forme choisie de N_d s'écrit d'après (4.4) avec cependant un choix légèrement différent quant à la définition du paramètre d'écart :

$$N_d(\beta_p; \vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \hat{\sigma} \beta_p} \exp \left[- \ln \left(\frac{\beta_p}{d_{00}} \right)^2 / (\hat{\sigma}^2) \right] \quad (4.8)$$

où d_{00} représente un diamètre caractéristique du nuage de particules et $\hat{\sigma}$ le paramètre sans dimension d'écart à ce diamètre.

Pour quantifier l'influence de $\hat{\sigma}$, les deux relations suivantes sont données en exemple :

$$\int_{e^{-\hat{\sigma}} d_{00}}^{e^{\hat{\sigma}} d_{00}} N_d(d) dd \approx 84\% \quad (4.9)$$

et :

$$\int_{e^{-2\hat{\sigma}} d_{00}}^{e^{2\hat{\sigma}} d_{00}} N_d(d) dd \approx 99.5\% \quad (4.10)$$

Les paramètres *a priori* inconnus de N_d sont donc d_{00} et $\hat{\sigma}$. Une illustration de l'influence de ces deux paramètres (d_{00} et $\hat{\sigma}$) est proposée à la Fig. 4.6.

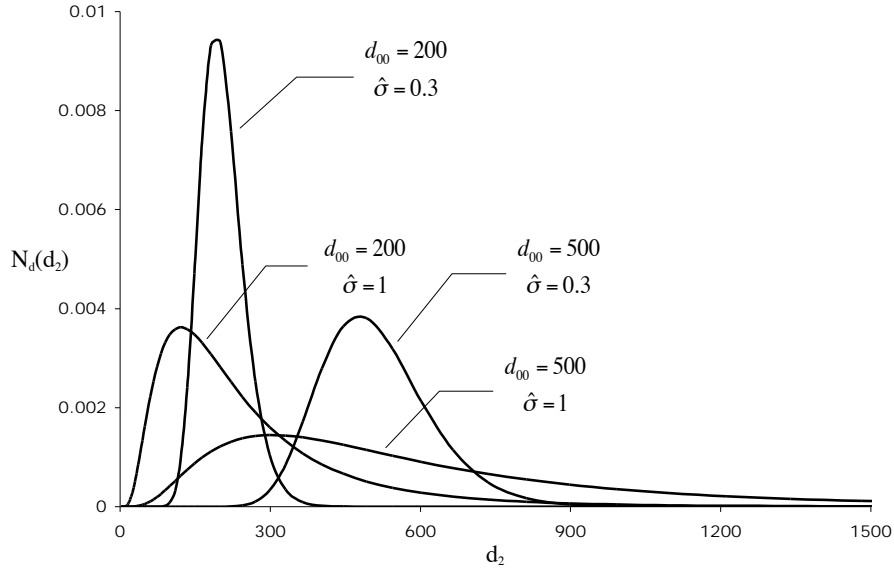


FIG. 4.6 – Valeurs typiques de N_d .
 d_2 en μm et $f(d_2)$ en μm^{-1} .

PDF de vitesse

La distribution de vitesse G_u pour un diamètre donné est choisie gaussienne. En approche quasi-brownienne isotrope [67], cette répartition est naturelle, et les récents travaux de Réveillon *et al* [57] ont montré que cette hypothèse se vérifiait également dans le cas de flammes de spray, (qui est une application principale de ce modèle).

La forme choisie de G_u est :

$$G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E_\tau}} \exp \left[-\frac{(\vec{c}_p - \vec{u}_\tau(\beta_p))^2}{2E_\tau} \right] \quad (4.11)$$

où E_τ est un paramètre assimilable à une énergie cinétique et \vec{u}_τ la vitesse conditionnée par le diamètre. Cette vitesse représente la vitesse probable des gouttes de même diamètre et se définit de façon analytique par :

$$\vec{u}_\tau(d_2) = \int \vec{c}_p f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p = d_2; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p \quad (4.12)$$

Les paramètres inconnus *a priori* de G_u sont \vec{u}_τ et E_τ .

$G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t)$ sera notée G_u par souci de simplification lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté. Les propriétés remarquables de G_u sont présentées ci-dessous et seront utilisées lors du calcul explicite des termes de fermeture du modèle multidisperse :

$$\int_{\Omega_u} \vec{c}_p G_u d\vec{c}_p = \vec{u}_\tau \quad (4.13)$$

$$\int_{\Omega_u} (\vec{c}_p - \vec{u}_\tau) G_u d\vec{c}_p = 0 \quad (4.14)$$

$$\int_{\Omega_u} (\vec{c}_p - \vec{u}_\tau)^2 G_u d\vec{c}_p = \int_{\Omega_u} (\vec{c}_p^2 - \vec{u}_\tau^2) G_u d\vec{c}_p \quad (4.15)$$

$$= 2E_\tau \quad (4.16)$$

$$\int_{\Omega_u} \vec{c}_p^2 G_u d\vec{c}_p = \vec{u}_\tau^2 + 2E_\tau \quad (4.17)$$

PDF de température

En l'absence de données expérimentales détaillées sur la répartition de température dans les brouillards de particules, la fonction de distribution de température G_θ est choisie également gaussienne sans autre but que de pouvoir donner un degré de liberté au système thermodynamique.

La forme choisie de G_θ s'écrit :

$$G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E_\Gamma}} \exp \left[-\frac{(\zeta_p - \theta_\Gamma(\beta_p))^2}{2E_\Gamma} \right] \quad (4.18)$$

où E_Γ représente un paramètre de dispersion et θ_Γ la température conditionnée par le diamètre définie selon :

$$\theta_\Gamma(d_2) = \int \zeta_p f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p = d_2; \vec{x}, t, \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p \quad (4.19)$$

Les paramètres inconnus *a priori* de G_θ sont θ_Γ et E_Γ .

4.2 Calcul analytique des moments

Moment d'ordre zéro

Les trois lois sont choisies normées et, bien que G_u et G_θ dépendent de β_p , leurs intégrales respectives sont choisies indépendantes de β_p :

$$\int_{\Omega_d} N_d(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p = 1 \quad (4.20)$$

$$\int_{\Omega_u} G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t) d\vec{c}_p = 1 \quad (4.21)$$

$$\int_{\Omega_\theta} G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t) d\zeta_p = 1 \quad (4.22)$$

Les hypothèses (4.8), (4.11) et (4.18) vérifient la relation du moment d'ordre zéro :

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega} f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p d\vec{c}_p d\zeta_p &= \iiint_{\Omega} n_2 N_d(\beta_p; \vec{x}, t) G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t) G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t) d\beta_p d\vec{c}_p d\zeta_p \\ &= n_2 \underbrace{\int_{\Omega_d} N_d(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p}_{=1} \underbrace{\int_{\Omega_u} G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t) d\vec{c}_p}_{=1} \underbrace{\int_{\Omega_\theta} G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t) d\zeta_p}_{=1} \\ &= n_2 \end{aligned} \quad (4.23)$$

avec, pour un cas tridimensionnel, $\Omega_d = \mathbb{R}^+$, $\Omega_u = \mathbb{R}^3$ et $\Omega_\theta = \mathbb{R}^+$.

Ces hypothèses impliquent également que la moyenne statistique de toute grandeur ne dépendant que de d_2 s'écrit simplement :

$$\begin{aligned} \{\Psi(d_2)\}_2 &= \frac{n_2}{n_2} \int_{\Omega_d} \Psi(\beta_p) N_d(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p \int_{\Omega_u} G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t) d\vec{c}_p \int_{\Omega_\theta} G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t) d\zeta_p \\ &= \int_{\Omega_d} \Psi(\beta_p) N_d(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p \end{aligned} \quad (4.24)$$

A l'aide de quelques manipulations sur les moments de f_2 , il est possible de remonter aux grandeurs transportées du problème et d'en déduire une relation déterminante pour chaque paramètre inconnu des FDP présumées.

Moment de diamètre d'ordre quelconque

Le moment d'ordre γ associé au diamètre β_p s'écrit de façon générique [83] :

$$\begin{aligned}
 S_\gamma &= n_2 \{d_2^\gamma\}_2 = \iiint_{\Omega} \beta_p^\gamma f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\
 &= n_2 \iiint_{\Omega} \beta_p^\gamma N_d(\beta_p; \vec{x}, t) G_u(\beta_p, \vec{c}_p; \vec{x}, t) G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \quad (4.25) \\
 &= n_2 \int_{\Omega} \beta_p^\gamma N_d(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p
 \end{aligned}$$

En injectant la forme de N_d (4.8) dans l'équation des moments du diamètre (4.25), S_γ s'écrit après intégration analytique :

$$S_\gamma = n_2 d_{00}^\gamma \exp(\hat{\sigma}^2 \gamma^2 / 4) \quad (4.26)$$

soit :

$$\{d_2^\gamma\}_2 = d_{00}^\gamma \exp(\hat{\sigma}^2 \gamma^2 / 4) \quad (4.27)$$

Les moments S_γ sont reliés aux grandeurs transportées par les relations :

$$S_0 = n_2 \quad (4.28)$$

$$S_2 = \frac{1}{\pi} \Sigma_2 \quad (4.29)$$

$$S_3 = \frac{6}{\pi} \alpha_2 \quad (4.30)$$

Et les grandeurs transportées sont reliées aux paramètres des formes présumées par les relations :

$$\alpha_2 = \frac{\pi}{6} n_2 d_{00}^3 \exp\left(\frac{9}{4} \hat{\sigma}^2\right) \quad (4.31)$$

$$\Sigma_2 = \pi n_2 d_{00}^2 \exp(\hat{\sigma}^2) \quad (4.32)$$

Diamètres moyens

A partir des moments S_γ , il est possible de définir des diamètres moyens d_{pq} [83 ; 84 ; 85] définis tels que :

$$d_{pq} = \frac{S_p \left(\frac{1}{p-q}\right)}{S_q} \quad , \quad p \neq q \quad (4.33)$$

Le diamètre moyen de Sauter correspond à d_{32} .

4.3 Détermination des paramètres

4.3.1 Détermination de d_{00} et $\hat{\sigma}$

Le nombre de gouttes peut être éliminé de l'équation (4.26) en utilisant le cas $\gamma = 3$ (choix arbitraire) tel que décrit en écoulement à particules ou à bulles selon [83] :

$$S_3 = n_2 d_{00}^3 \exp(\hat{\sigma}^2 3^2/4) \quad (4.34)$$

$$\Rightarrow n_2 = \frac{6\alpha_2}{\pi} d_{00}^{-3} \exp\left(\frac{-9\sigma^2}{4}\right) \quad (4.35)$$

En combinant (4.26) et (4.35), S_γ s'exprime sous la forme :

$$S_\gamma = \frac{6}{\pi} \alpha_2 d_{00}^{\gamma-3} \exp\left[\frac{\hat{\sigma}^2}{4}(\gamma^2 - 9)\right] \quad (4.36)$$

A l'aide des cas particuliers $\gamma = 2$ et $\gamma = 3$ et des relations (4.29) et (4.30) qui relient respectivement S_2 et S_3 à α_2 et Σ_2 , il est possible de déduire une expression de $\hat{\sigma}$ uniquement en fonction des grandeurs transportées :

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{2}{3} \ln\left(\frac{36\pi n_2 \alpha_2^2}{\Sigma_2^3}\right)} \quad (4.37)$$

Une fois $\hat{\sigma}$ connu, l'expression de d_{00} peut être déduite :

$$d_{00} = \left(\frac{6\alpha_2}{n_2\pi} \exp(-2.25\hat{\sigma}^2)\right)^{1/3} \quad (4.38)$$

ou sans utiliser $\hat{\sigma}$:

$$d_{00} = \frac{\Sigma_2^{3/2}}{(\pi n_2)^{5/6} (6\alpha_2)^{2/3}} \quad (4.39)$$

La présence de puissances non entières rend cette dernière expression très délicate au niveau numérique et ne sera donc utilisée que dans les développements analytiques.

Equations de transport de d_{00} et $\hat{\sigma}^2$

En exprimant α_2 et Σ_2 en fonction de n_2 , d_{00} et $\hat{\sigma}$ à l'aide des relations (4.31) et (4.32) et en reportant dans leurs équations de transport respectives (3.60), (3.66), on

obtient un système d'Equation aux Dérivées Partielles (EDP) :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(n_2\pi/6d_{00}^3e^{9\hat{\sigma}^2/4}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(n_2\pi/6d_{00}^3e^{9\hat{\sigma}^2/4})U_{2,i} = J_1 \\ \frac{\partial}{\partial t}(n_2\pi d_{00}^2e^{\hat{\sigma}^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(n_2\pi d_{00}^2e^{\hat{\sigma}^2})U_{2,i} = J_2 \\ \frac{\partial}{\partial t}n_2 + \frac{\partial}{\partial x_i}n_2U_{2,i} = J_3 \end{cases} \quad (4.40)$$

avec

$$\begin{cases} J_1 = \frac{\Gamma_2}{\rho_2} \\ J_2 = \mathbb{T}(\sigma_2) + \mathbb{C}(\sigma_2) + \Gamma_s \\ J_3 = \mathbb{T}(\frac{1}{m_2}) + \mathbb{C}(1) \end{cases} \quad (4.41)$$

Après développement, ce système peut se mettre sous la forme :

$$\begin{cases} \alpha_2 \left(\frac{1}{n_2} \left(\frac{\partial}{\partial t}(n_2 + \frac{\partial}{\partial x_i}n_2U_{2,i}) \right) + \frac{3}{d_{00}} \left(\frac{\partial}{\partial t}d_{00} + U_{2,i} \frac{\partial}{\partial x_i}d_{00} \right) + \frac{9}{4} \left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{\sigma}^2 + U_{2,i} \frac{\partial}{\partial x_i}\hat{\sigma}^2 \right) \right) = J_1 \\ \Sigma_2 \left(\frac{1}{n_2} \left(\frac{\partial}{\partial t}(n_2 + \frac{\partial}{\partial x_i}n_2U_{2,i}) \right) + \frac{2}{d_{00}} \left(\frac{\partial}{\partial t}d_{00} + U_{2,i} \frac{\partial}{\partial x_i}d_{00} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{\sigma}^2 + U_{2,i} \frac{\partial}{\partial x_i}\hat{\sigma}^2 \right) \right) = J_2 \\ \frac{\partial}{\partial t}n_2 + \frac{\partial}{\partial x_i}n_2U_{2,i} = J_3 \end{cases} \quad (4.42)$$

Par substitution et combinaisons linéaires, la résolution de ce système donne :

$$\frac{1}{d_{00}} \left(\frac{\partial d_{00}}{\partial t} + U_{2,i} \frac{\partial d_{00}}{\partial x_i} \right) = -\frac{2J_1}{3\alpha_2} + \frac{3J_2}{2\Sigma_2} - \frac{5J_3}{6n_2} \quad (4.43)$$

$$\frac{\partial \hat{\sigma}^2}{\partial t} + U_{2,i} \frac{\partial \hat{\sigma}^2}{\partial x_i} = \frac{2J_1}{3\alpha_2} - \frac{J_2}{\Sigma_2} + \frac{J_3}{3n_2} \quad (4.44)$$

Ces équations montrent que d_{00} et $\hat{\sigma}^2$ se comportent comme des scalaires passifs en l'absence d'évaporation et de flux décorrélés (ce qui est le cas en monodisperse). On remarque également que d_{00} et $\hat{\sigma}^2$ ont des variations *a priori* de signe opposé. Si, par ailleurs, on réécrit l'équation (4.43) en faisant apparaître $\ln(d_{00})$, on obtient :

$$\frac{\partial \ln(d_{00})}{\partial t} + U_{2,i} \frac{\partial \ln(d_{00})}{\partial x_i} = -\frac{2J_1}{3\alpha_2} + \frac{3J_2}{2\Sigma_2} - \frac{5J_3}{6n_2} \quad (4.45)$$

L'écriture sous cette forme permet alors de constater que $\hat{\sigma}^2$ varie linéairement en fonction des flux décorrélés alors que d_{00} varie de façon exponentielle.

4.3.2 Détermination de \vec{u}_τ

La vitesse \vec{u}_τ introduite à l'équation (4.21) est une inconnue qui nécessite d'être évaluée pour fermer le modèle. On choisit de présumer cette forme.

L'approche par vitesse présumée a déjà été explorée en Lagrangien [55 ; 54]. Les travaux de Ferry et Balachandar [19] notamment se basent sur une hypothèse de développement de la vitesse particulière autour de la vitesse gazeuse. A condition

que le temps de relaxation de la particule τ_{drag} soit suffisamment petit devant le temps caractéristique de la turbulence τ_{turb} , ils proposent :

$$\vec{V}^{(k)} = \vec{u}_1 - \tau_{drag}^{(k)} \frac{D\vec{u}_1}{Dt} + O\left(\tau_{drag}^{(k)2}\right) \quad (4.46)$$

Cette forme fait l'hypothèse que la particule va suivre le champ gazeux avec un retard proportionnel à son temps de relaxation. Dans sa définition même, cette méthode ne peut s'appliquer qu'à des particules prédisposées à suivre le fluide porteur, c'est pourquoi elle nécessite des particules à faible St .

Une forme présumée est développée ici spécifiquement pour les écoulements Euleriens, pour toute la gamme de St , sans hypothèse sur le temps de relaxation des particules.

Dans le cadre de particules soumises principalement à un effort de traînée, le mouvement d'une particule est quasiment conditionnée par le Stokes associé à son diamètre. Cette propriété va être utilisée pour distinguer trois régimes :

1. A part dans la zone d'injection, plus une particule possède un faible Stokes, plus sa vitesse est proche de la vitesse du gaz.
2. Plus une particule possède un fort Stokes, plus sa vitesse est proche de sa vitesse d'injection.
3. Il existe un diamètre appelé d_{St} qui marque la séparation entre les comportements 1. et 2.

La vitesse moyenne de particules de même diamètre \vec{u}_τ est présumée de façon à respecter ces trois régimes :

$$\vec{u}_\tau = \vec{u}_1 + (\vec{u}_\infty - \vec{u}_1) \exp\left(-\frac{d_{St}^2}{d_2^2}\right) \quad (4.47)$$

Une représentation monodimensionnelle de \vec{u}_τ dans le cas où $u_\infty > u_1$ est proposée à la Fig. 4.7.

Les différents paramètres de la forme présumée de \vec{u}_τ vont maintenant être explicités.

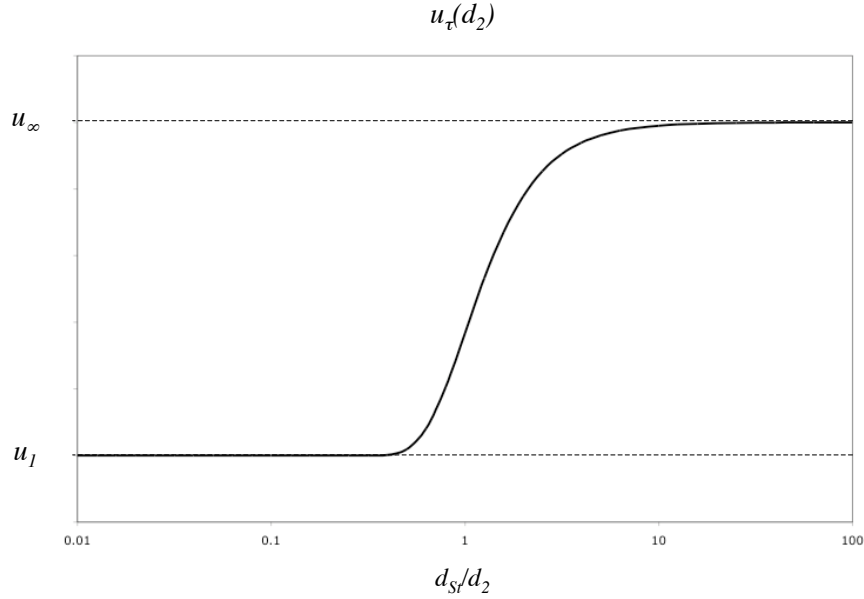


FIG. 4.7 – Forme présumée de la vitesse conditionnée

Paramètres de \vec{u}_τ

d_{St} représente le diamètre tel que $St(d_{St}) = 1$. C'est un diamètre fictif, en partie défini par l'utilisateur, qui sert à marquer la séparation entre les comportements de traceur et de projectile lourd.

Son expression est :

$$d_{St} = \left(\frac{18\mu_1}{\rho_2} \tau_{conv} \right)^{1/2} \quad (4.48)$$

ce qui peut aussi se mettre sous la forme :

$$d_{St} = \frac{1}{\sqrt{St(d_2 = 1)}} \quad (4.49)$$

Dans la relation (4.48), les valeurs de $\bar{\mu}_1$ et $\bar{\rho}_2$ utilisées sont les valeurs locales. Par contre, le temps caractéristique de convection τ_{conv} est un paramètre libre qui nécessite d'être donné par l'utilisateur. Des règles d'estimation de ce paramètre sont données à la sous-section 9.1.4.

La vitesse \vec{u}_∞ est une évaluation de la vitesse des particules de plus fort Stokes mais sert également d'estimation de la vitesse d'injection des particules. Cette vitesse est un paramètre qui se déduit de la définition (3.25) de U_2 en remplaçant \vec{u}_τ

par la forme présumée (4.47) :

$$\begin{aligned}
 \vec{U}_2 &= \langle \vec{u}_2 \rangle_2 = \frac{1}{\alpha_2} \int \frac{\pi}{6} \beta_p^3 \vec{c}_p f_2(\vec{c}_p, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t) d\vec{c}_p d\zeta_p d\beta_p \\
 &= \frac{\pi n_2}{6\alpha_2} \int \beta_p^3 \vec{u}_\tau(\beta_p) N(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p \\
 &= \vec{u}_1 + (\vec{u}_\infty - \vec{u}_1) \frac{\pi n_2}{6\alpha_2} \int \beta_p^3 \exp\left(-\frac{d_{St}^2}{\beta_p^2}\right) N(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p \quad (4.50) \\
 &= \vec{u}_1 + (\vec{u}_\infty - \vec{u}_1) \underbrace{\int \frac{n_2 \beta_p^3}{S_3} \exp\left(-\frac{d_{St}^2}{\beta_p^2}\right) N(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p}_{K_3(d^*)}
 \end{aligned}$$

avec S_3 défini en (4.36) et $K_3(d^*)$ une fonction adimensionnelle de la variable adimensionnelle d^* définie par la relation :

$$d^* = \sqrt{St(d_{00})} = \frac{d_{00}}{d_{St}} \quad (4.51)$$

$K_3(d^*)$ ne dépend que de grandeurs connues et sa connaissance permettrait de formuler explicitement \vec{u}_∞ :

$$\vec{u}_\infty = \vec{u}_1 + \frac{\vec{U}_2 - \vec{u}_1}{K_3(d^*)} \quad (4.52)$$

Comme la moyenne d'un ensemble est forcément comprise entre les valeurs extrêmes prises par cet ensemble et que, par construction, $|u_{\tau,i}(d_2) - u_{1,i}| \leq |u_{\infty,i} - u_{1,i}|$ et $|u_{\tau,i}(d_2) - u_{\infty,i}| \leq |u_{\infty,i} - u_{1,i}|$, on peut énoncer que :

$$0 \leq K_3(d^*) \leq 1 \quad (4.53)$$

Pour le cas particulier $\vec{u}_\infty = \vec{u}_1$, la répartition (4.47) impose $\vec{U}_2 = \vec{u}_1$. Dans ce cas de figure, en prolongeant par continuité, $K_3(d^*)$ vaut tout simplement 1.

Détermination de K_3

Dans le cas particulier où toutes les particules proviennent de la même source et ont été injectées à la même vitesse ' \vec{u}_{inj} ', il est plus simple de spécifier directement ' $\vec{u}_\infty = \vec{u}_{inj}$ ' dans (4.47). Dans le cas contraire, ' $K_3(d^*)$ ' nécessite d'être évalué mais n'est pas calculable symboliquement sous la forme définie en (4.50) car la quantité $e^{-\frac{d_{St}^2}{\beta_p^2}} N(\beta_p; \vec{x}, t)$ n'est pas intégrable analytiquement.

A l'inverse, la fonction intégrale $\int \beta_p^\gamma N(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p$ est connue analytiquement pour tout γ réel et cette intégrale s'écrit :

$$\int \beta_p^\gamma N(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p = \frac{1}{2} d_{00}^\gamma e^{(\gamma \hat{\sigma}/2)^2} \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(\beta_p/d_{00})}{\hat{\sigma}} - \frac{\gamma \hat{\sigma}}{2} \right) \quad (4.54)$$

L'intégrale (4.54) peut être estimée en approximant $e^{-\frac{d_{St}^2}{\beta_p^2}}$ par morceaux sur $[0, d_{St}]$ et $[d_{St}, +\infty]$ par des polynômes :

$$e^{-\frac{d_{St}^2}{d_2^2}} = \begin{cases} c_1 \left(\frac{d_2}{d_{St}} \right)^{p_1} & \text{si } d_2 \in [0, d_{St}] \\ 1 - c_2 \left(\frac{d_2}{d_{St}} \right)^{p_2} & \text{si } d_2 \in [d_{St}, +\infty] \end{cases} \quad (4.55)$$

où $c_1 = 0.39, p_1 = 3.27, c_2 = 0.8, p_2 = -1.58$.

Une visualisation de la fonction et de son approximation sont proposées à la Fig. 4.8. Les écarts observables ne sont pas pénalisants dans le sens où l'on cherche à exprimer un effet de transition entre deux comportements asymptotiques et non pas une quantification exacte de la répartition des vitesses.

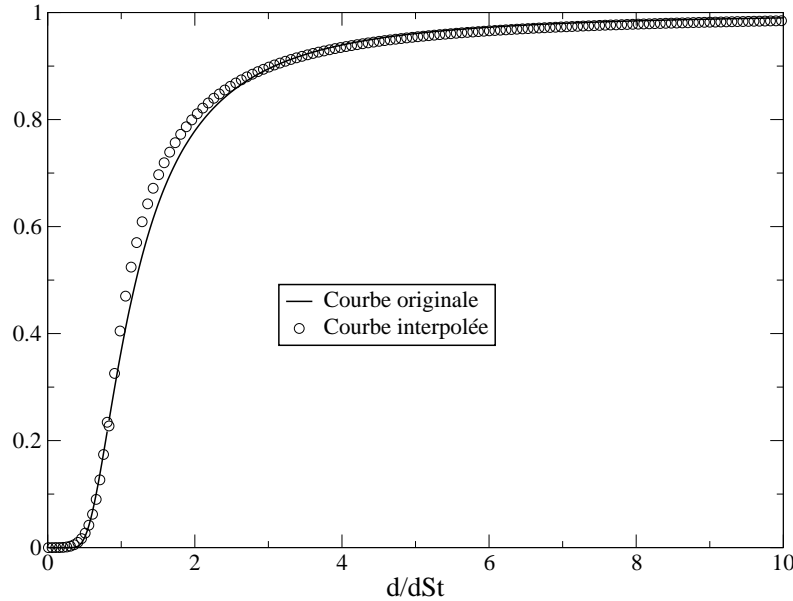


FIG. 4.8 – Interpolation de $e^{-\frac{d_{St}^2}{d^2}}$

A l'aide de l'approximation (4.55), $K_3(d^*)$ s'exprime sous la forme :

$$K_3(d^*) = \int_0^{d_{St}} c_1 \left(\frac{d}{d_{St}} \right)^{p_1} dd + \int_{d_{St}}^{\infty} \left(1 - c_2 \left(\frac{d}{d_{St}} \right)^{p_2} \right) dd \quad (4.56)$$

Et, en intégrant analytiquement grâce à la relation (4.54), on obtient :

$$\begin{aligned} K_3(d^*) = & \frac{c_1}{2} (d^*)^{p_1} \exp \left(\left(\frac{(3+p_1)^2 - 9}{4} \right) \hat{\sigma}^2 \right) \left(1 - \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{(3+p_1)\hat{\sigma}}{2} \right) \right) \\ & + \frac{1}{2} \left(1 + \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \hat{\sigma} \right) \right) \\ & - \frac{c_2}{2} (d^*)^{p_2} \exp \left(\left(\frac{(3+p_2)^2 - 9}{4} \right) \hat{\sigma}^2 \right) \left(1 + \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{(3+p_2)\hat{\sigma}}{2} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.57)$$

La connaissance de $K_3(d^*)$ donne \vec{u}_∞ qui donne à son tour \vec{u}_τ . Ces expressions permettent de finaliser le modèle multidisperse aux travers du calcul des différents termes de fermeture.

4.3.3 Détermination de θ_Γ et E_Γ

La température θ_Γ introduite à l'équation (4.22) est une inconnue qui doit être évaluée pour fermer le modèle. En première approche, on suppose cette température indépendante de d_2 .

$$\theta_\Gamma = \theta_2 \quad (4.58)$$

et E_Γ est choisi constant et égal à $\sqrt{2}$.

La proposition d'une forme présumée de θ_Γ permettant de prendre en compte une dispersion de température corrélé à la dispersion de diamètre est une des perspectives de ce travail.

4.4 Flux décorrélés

Les flux décorrélés représentent le transport moyen de quantités selon une vitesse d'écart moyenne à la vitesse moyenne en raison de l'entraînement différencié des particules selon leur taille. C'est une particularité de l'aspect polydisperse : ces flux sont nuls en monodisperse.

Une illustration permet de concevoir ce que représente un flux décorrélé de densité de particules (Fig. 4.9). Un cas concret avec des particules de tailles différentes est mis en parallèle avec un cas statistique représentatif du cas réel.

En partant du cas concret pour déterminer des propriétés d'ensemble, on voit que la particule très lourde est prépondérante sur le calcul de la vitesse mésoscopique massique $\langle \vec{u}_2 \rangle_2 = \vec{U}_2$. Les particules légères beaucoup plus nombreuses sont par contre prépondérantes pour le calcul de la moyenne statistique $\{\vec{u}_2\}_2$. Chaque particule légère présente un écart important à la vitesse \vec{U}_2 , noté u_2'' . La moyenne de ces écarts représente la vitesse décorrelée moyenne $\{\vec{u}_2''\}_2$.

Si la densité de particules est transportée selon la vitesse \vec{U}_2 , c'est-à-dire si on 'force' les particules légères à suivre la trajectoire des plus lourdes, on aura infléchi leur trajectoire de façon artificielle. Dans le but de permettre à chaque particule de poursuivre une trajectoire physique - les lourdes comme les légères et tous les intermédiaires imaginables également - il est donc nécessaire de distinguer dans quelle direction va être transportée la plus grande partie de la masse (la particule lourde) et dans quelle direction va être transportée le plus grand nombre (les particules légères).

Dans la formulation par filtrage statistique, la fraction massique $\alpha_2 \rho_2$ représente la masse et la densité de particule n_2 représente le plus grand nombre. Donc $\alpha_2 \rho_2$ doit être transportée selon $\langle \vec{u}_2 \rangle_2$ et n_2 selon $\{\vec{u}_2\}_2$. Comme le système choisi transporte toutes les grandeurs à la vitesse $\langle \vec{u}_2 \rangle_2$, il est nécessaire de prendre en compte le terme correctif $\{\vec{u}_2''\}_2$ pour le transport de la densité de particule et le terme $\mathbb{T}(\frac{1}{m_2})$ représente le flux moyen de densité de particules correspondant à cette vitesse corrective.

Un autre élément important illustré sur la figure est l'agencement des vitesses $\langle \vec{u}_2 \rangle_2$ et $\{\vec{u}_2\}_2$ par rapport à la vitesse du fluide porteur \vec{u}_1 . Comme la traînée est une force de rappel vers la vitesse du fluide porteur et que les particules les plus lourdes associées à la vitesse $\langle \vec{u}_2 \rangle_2$ sont aussi celles qui relaxent le moins vite, il est possible d'écrire en considérant \vec{u}_1 constant dans le temps :

$$\vec{u}_\infty - \vec{u}_1 = k_1(\langle \vec{u}_2 \rangle_2 - \vec{u}_1) \quad (4.59)$$

$$\langle \vec{u}_2 \rangle_2 - \vec{u}_1 = k_2(\{\vec{u}_2\}_2 - \vec{u}_1) \quad (4.60)$$

avec $0 \leq k_2 \leq k_1 \leq 1$, ce qui revient à dire que $\langle \vec{u}_2 \rangle_2$ est géométriquement toujours 'entre' \vec{u}_∞ et \vec{u}_1 et que $\{\vec{u}_2\}_2$ est géométriquement toujours 'entre' $\langle \vec{u}_2 \rangle_2$ et \vec{u}_1 . Cette propriété permet de définir *a priori* les trajectoires probables d'un nuage polydisperse.

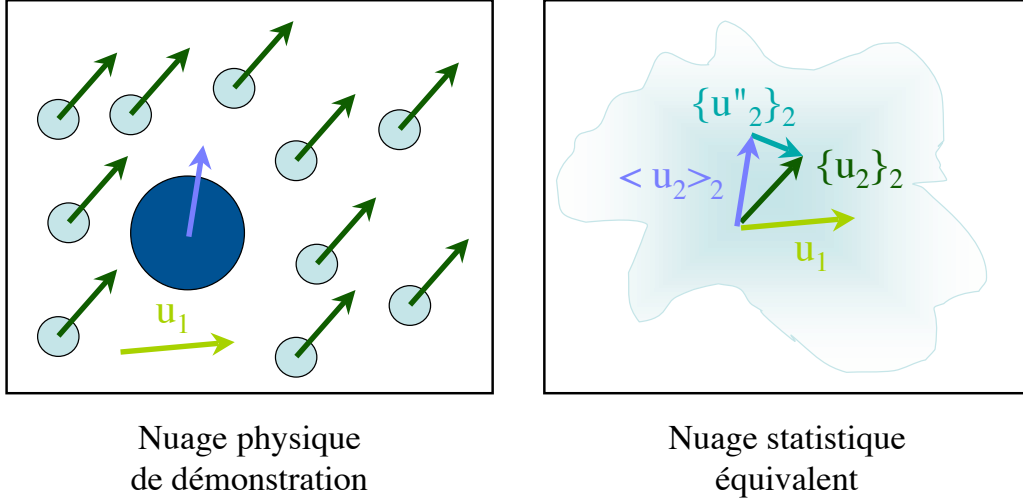


FIG. 4.9 – Illustration du flux décorrélé moyen de densité de particules

4.4.1 Flux décorrélé moyen de densité de particules

L'équation (3.55) fait apparaître un terme $\mathbb{T}(\frac{1}{m_2})$ non fermé et défini selon :

$$\mathbb{T}(\frac{1}{m_2}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} n_2 \{u''_{2,i}\}_2 \quad (4.61)$$

Ce terme représente le flux de particules par transport décorrélé moyen, ou, exprimé autrement, le transport des particules par leur écart à la vitesse mésoscopique massique \vec{U}_2 .

L'écriture de ce terme exprime en fait que le transport de la densité de particule n_2 doit s'effectuer à la vitesse $\{\vec{u}_2\}_2$. Cependant, cette vitesse ne fait pas partie des variables choisies dans description utilisée. Il apparaît donc un terme de flux provenant de la décomposition de $\{\vec{u}_2\}_2$ en $\langle \vec{u}_2 \rangle_2 + \{\vec{u}''_2\}_2$ (3.29) qui représente la correction à apporter au flux de n_2 pour obtenir le transport par $\{\vec{u}_2\}_2$ dans un nuage polydisperse.

Dans le but d'évaluer les flux décorrélés, il faut donc exprimer la quantité $n_2 \{u''_2\}_2$

à partir des variables connues :

$$\begin{aligned}
 n_2\{u_{2,i}''\}_2 &= n_2\{u_{2,i} - U_{2,i}\}_2 \\
 &= n_2\{u_{2,i}\}_2 - n_2U_{2,i} \\
 &= \int c_{p,i}f_2(c_{p,i}, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t)dc_{p,i}d\zeta_p d\beta_p - n_2U_{2,i} \\
 &= n_2 \int_{\Omega_d} \left(\int_{\Omega_u} c_{p,i}G_u(\beta_p, c_{p,i}; \vec{x}, t)dc_{p,i} \right) N(\beta_p; \vec{x}, t)d\beta_p \underbrace{\int_{\Omega_\theta} G_\theta(\beta_p, \zeta_p; \vec{x}, t)d\zeta_p}_{=1} - n_2U_{2,i}
 \end{aligned} \tag{4.62}$$

Grâce à la relation (4.13), l'équation précédente s'écrit :

$$n_2\{u_{2,i}''\}_2 = n_2 \int_{\Omega_d} u_{\tau,i}(\beta_p)N(\beta_p; \vec{x}, t)d\beta_p - n_2U_{2,i} \tag{4.63}$$

Le premier terme de droite est le seul à devoir être développé :

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega_d} u_{\tau,i}(\beta_p)N(\beta_p; \vec{x}, t)d\beta_p &= \int_0^{+\infty} \left[u_{1,i} + (u_{\infty,i} - u_{1,i})e^{-\frac{d_{St}^2}{\beta_p^2}} \right] N(\beta_p; \vec{x}, t)d\beta_p \\
 &= u_{1,i} + (u_{\infty,i} - u_{1,i}) \underbrace{\int_0^{+\infty} e^{-\frac{d_{St}^2}{\beta_p^2}} N(\beta_p; \vec{x}, t)d\beta_p}_{K_0(d^*)}
 \end{aligned} \tag{4.64}$$

où $K_0(d^*)$ représente une fonction adimensionnelle que l'on peut calculer à l'aide des relations (4.54) et (4.55) :

$$\begin{aligned}
 K_0(d^*) &= \frac{c_1}{2}(d^*)^{p_1} \exp\left(\frac{p_1^2 \hat{\sigma}^2}{4}\right) \left(1 - \mathbf{Erf}\left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{p_1 \hat{\sigma}}{2}\right)\right) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \left(1 + \mathbf{Erf}\left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}}\right)\right) \\
 &\quad - \frac{c_2}{2}(d^*)^{p_2} \exp\left(\frac{p_2^2 \hat{\sigma}^2}{4}\right) \left(1 + \mathbf{Erf}\left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{p_2 \hat{\sigma}}{2}\right)\right)
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

Comme la moyenne d'un ensemble est forcément comprise entre les valeurs extrêmes prises par cet ensemble et que, par construction, $|u_{\tau,i}(d_2) - U_{2,i}| \leq \max(|U_{2,i} - u_{1,i}|, |U_{2,i} - u_{\infty,i}|)$, on peut énoncer que

$$0 \leq K_0(d^*) \leq 1 \tag{4.66}$$

En simplifiant, $n_2\{u_{2,i}''\}_2$ s'écrit :

$$n_2\{u_{2,i}''\}_2 = [(u_{1,i} - U_{2,i}) + K_0(d^*)(u_{\infty,i} - u_{1,i})] n_2 \tag{4.67}$$

et enfin en utilisant la relation (4.52), $n_2\{u_{2,i}''\}_2$ s'écrit aussi :

$$n_2\{u_{2,i}''\}_2 = (u_{1,i} - U_{2,i}) \left(1 - \frac{K_0(d^*)}{K_3(d^*)}\right) n_2 \tag{4.68}$$

4.4.2 Flux décorrélé moyen de densité de surface

$\mathbb{T}(\frac{\sigma_2}{m_2}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} n_2 \{\sigma_2 u_{2,i}\}_2$ représente le flux de surface par transport décorrélé moyen. De même que pour la densité de particules, la densité de surface est transportée à la vitesse $\{\vec{u}_2\}_2$ et nécessite un terme de correction de flux.

$$\begin{aligned} \{n_2 \sigma_2 u_{2,i}\}_2 &= n_2 \{\sigma_2 u_{2,i} - U_{2,i}\}_2 \\ &= n_2 \{\sigma_2 u_{2,i}\}_2 - n_2 \{\sigma_2\}_2 U_{2,i} \\ &= \int \sigma_p c_{p,i} f_2(c_{p,i}, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t) d c_{p,i} d \zeta_p d \beta_p - \Sigma_2 U_{2,i} \end{aligned} \quad (4.69)$$

En remplaçant f_2 par sa forme présumée, en utilisant la relation (4.13) et en simplifiant, la fermeture s'écrit :

$$n_2 \{\sigma_2 u_{2,i}\}_2 = n_2 \pi \int_{\Omega_d} \beta_p^2 u_{\tau,i}(\beta_p) N(\beta_p; \vec{x}, t) d \beta_p - \Sigma_2 U_{2,i} \quad (4.70)$$

Le premier terme de droite est le seul à devoir être développé :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_d} \beta_p^2 u_{\tau,i}(\beta_p) N(\beta_p; \vec{x}, t) d \beta_p &= \int_0^{+\infty} \beta_p^2 \left[u_{1,i} + (u_{\infty,i} - u_{1,i}) e^{-\frac{d^2 S_t}{\beta_p^2}} \right] N(\beta_p; \vec{x}, t) d \beta_p \\ &= u_{1,i} S_2 + (u_{\infty,i} - u_{1,i}) \underbrace{\int_0^{+\infty} \beta_p^2 e^{-\frac{d^2 S_t}{\beta_p^2}} N(\beta_p; \vec{x}, t) d \beta_p}_{K_2(d^*)} \\ &= (u_{1,i} - U_{2,i}) \Sigma_2 + K_2(d^*) (u_{\infty,i} - u_{1,i}) \Sigma_2 \end{aligned} \quad (4.71)$$

et enfin en utilisant la relation (4.52), $n_2 \{\sigma_2 u_{2,i}\}_2$ s'écrit simplement :

$$n_2 \{\sigma_2 u_{2,i}\}_2 = (u_{1,i} - U_{2,i}) \left(1 - \frac{K_2(d^*)}{K_3(d^*)} \right) \Sigma_2 \quad (4.72)$$

où $K_2(d^*)$ représente une fonction adimensionnelle que l'on peut calculer à l'aide des relations (4.54) et (4.55) :

$$\begin{aligned} K_2(d^*) &= \frac{c_1}{2} (d^*)^{p_1} \exp \left(\left(\frac{(2+p_1)^2}{4} - 1 \right) \hat{\sigma}^2 \right) \left(1 - \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{(2+p_1)\hat{\sigma}}{2} \right) \right) \\ &+ \frac{1}{2} \left(1 + \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \hat{\sigma} \right) \right) \\ &- \frac{c_2}{2} (d^*)^{p_2} \exp \left(\left(\frac{(2+p_2)^2}{4} - 1 \right) \hat{\sigma}^2 \right) \left(1 + \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{(2+p_2)\hat{\sigma}}{2} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.73)$$

4.4.3 Flux décorrélé moyen de QDM

Le terme $\mathbb{T}(u''_{2,j}) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,i} u''_{2,j} \rangle_2$ représente le flux de QDM par transport décorrélé moyen. Ce sont avec le flux décorrélé d'EQB les seuls termes non nuls en monodisperse car ils ne dépendent pas du diamètre. Ces termes ont donc déjà été étudiés et il est par conséquent possible de s'inspirer des corrélations existantes. D'après les travaux de Simonin [67] et Kaufmann [27], $\alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,i} u''_{2,j} \rangle_2$ est modélisé par analogie avec le tenseur des contraintes des équations de Navier-Stokes à l'aide d'une pression pour les termes diagonaux et d'une viscosité pour les termes anti-diagonaux :

$$\alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,i} u''_{2,j} \rangle_2 = p_{QB} \delta_{ij} + \tau_{2,ij} \quad (4.74)$$

où

$$\tau_{2,ij} = \mu_{QB} \left(\frac{\partial u_{2,j}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{2,i}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{2,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (4.75)$$

avec $\tau_{2,ij}$ tenseur des contraintes visqueuses, p_{QB} pression quasi-brownienne et μ_{QB} viscosité cinématique quasi-brownienne.

Pression quasi-brownienne

La pression quasi-brownienne p_{QB} peut être estimée selon une approximation de Boussinesq en faisant une analogie entre la définition thermodynamique de la température (grandeur caractérisant l'agitation des molécules) et la définition de l'énergie quasi-brownienne (grandeur caractérisant l'agitation des particules). Dans ce cas, elle s'écrit sous la forme d'une équation d'état selon :

$$P_{QB} = \frac{2}{3} E_{QB} \quad (4.76)$$

Il est alors nécessaire d'utiliser l'équation de transport de l'énergie quasi-brownienne (3.78) pour connaître E_{QB} .

La pression quasi-brownienne peut également être évaluée sans transporter d'équation grâce à une corrélation basée sur un bilan de QDM en turbulence homogène

isotrope comme proposé par Février [21] :

$$p_{QB} = \frac{2}{3}\eta_{QB} q_{p^2} \quad (4.77)$$

$$\eta_{QB} = 4 \frac{q_{f@p} q_{p^2}}{(q_{fp})^2} - 1 \quad (4.78)$$

$$q_{f@p} = q_{f^2} = \frac{1}{2} \langle u_{1,i} u_{1,i} \rangle_2 \quad (4.79)$$

$$q_{p^2} = \frac{1}{2} \langle u_{2,i} u_{2,i} \rangle_2 \quad (4.80)$$

$$q_{fp} = \frac{1}{2} \langle u_{1,i} u_{2,i} \rangle_2 \quad (4.81)$$

Dans ce cas, seule la partie diagonale du tenseur ($\alpha_2 \rho_2 \langle u_{2,i} u_{2,i} \rangle_2$) est considérée.

Viscosité quasi-brownienne

Le tenseur présenté en (4.75) possède un paramètre visqueux. Dans les équations de Navier-Stokes, ce terme contient un temps caractéristique de collision entre les molécules. Pour les écoulements diphasiques, en l'absence de collision, le temps caractéristique utilisé pour la modélisation est le temps de relaxation des particules τ_{drag} . La viscosité quasi-brownienne se définit alors selon :

$$\nu_{QB} = \frac{\tau_{drag}}{3} E_{QB} \quad (4.82)$$

A nouveau, la connaissance du terme E_{QB} est nécessaire pour évaluer cette viscosité. La viscosité cinétique et la viscosité dynamique sont reliée par :

$$\mu_{QB} = \alpha_2 \rho_2 \nu_{QB} \quad (4.83)$$

La pertinence de cette modélisation dans une configuration turbulente anisotrope est discutée au chapitre 7.

4.4.4 Flux décorréolé moyen d' E_{QB} et diffusion quasi-brownienne

L'équation de transport d'énergie quasi-brownienne (3.78) présente une corrélation de troisième ordre notée $\mathbb{T}(\frac{1}{2} u_{2,j} u_{2,j} u_{2,i})$. Dans la simulation statistique des écoulements diphasiques, cette corrélation est modélisée par un terme diffusif selon l'équivalent d'une loi de Fick pour la température [67] :

$$\alpha_2 \rho_2 \langle u_{2,j} u_{2,j} u_{2,i} \rangle_2 = -\kappa_{QB} \frac{\partial E_{QB}}{\partial x_i} \quad (4.84)$$

avec κ_{QB} diffusion quasi-brownienne.

Diffusion quasi-brownienne

La diffusion quasi-brownienne κ_{QB} est modélisée par analogie au coefficient de diffusion de l'énergie cinétique fluctuante des particules du modèle à deux-fluides [67] [68] :

$$\kappa_{QB} = \frac{10}{27} \alpha_2 \rho_2 E_{QB} \quad (4.85)$$

La pertinence de cette modélisation dans une configuration turbulente anisotrope est discutée au chapitre 7.

4.4.5 Efforts extérieurs

Pour des particules lourdes, avec des diamètres assez petits, les effets d'histoire et de masse ajoutée sont négligeables [27]. Les efforts extérieurs sont donc réduits à la traînée de Stokes (*cf* également l'hypothèse 6 p.56). La correction de Tchen[73] est ajoutée pour la prise en compte de la turbulence et la traînée modélisée pour une particule s'écrit :

$$\frac{F_i}{m_2} = \frac{u_{1,i} - u_{2,i}}{\tau_{drag}(d_2)} \quad (4.86)$$

où $\tau_{drag}(d_2)$ représente le temps de Stokes (2.8) pour une particule de diamètre d_2 .

Traînée polydisperse

En injectant l'expression (4.86) dans $\alpha_2 \rho_2 < \frac{F_i}{m_2} >_2$ et en utilisant les relations (4.47) et (4.13), le terme source de traînée moyen $\mathbf{F}_{d,i}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F}_{d,i} &= \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{F_i}{m} \right\rangle_2 \\
 &= \alpha_2 \rho_2 \left\langle \frac{u_{1,i} - u_{2,i}}{\tau_{drag}(d_2)} \right\rangle_2 \\
 &= \frac{\pi \rho_2}{6} \int \beta_p^3 \left(\frac{u_{1,i} - u_{2,i}}{\tau_{drag}(\beta_p)} \right) f_2(c_{p,i}, \zeta_p, \beta_p; \vec{x}, t) d c_{p,i} d \zeta_p d \beta_p \\
 &= \frac{\alpha_2 \rho_2}{\tau_{drag}(d_{00})} \frac{1}{d_{00} e^{9\hat{\sigma}^2/4}} \int_{\Omega_d} \beta_p (u_{1,i} - u_{\tau,i}) N(\beta_p; \vec{x}, t) d \beta_p \\
 &= \frac{\alpha_2 \rho_2}{\tau_{drag}(d_{00})} \frac{1}{d_{00} e^{9\hat{\sigma}^2/4}} \int_0^{+\infty} \beta_p (u_{1,i} - u_{\infty,i}) e^{-\frac{d_{\zeta t}^2}{\beta^2}} N(\beta_p; \vec{x}, t) d \beta_p \\
 &= \frac{\alpha_2 \rho_2}{\tau_{drag}(d_{00})} (u_{1,i} - u_{\infty,i}) \underbrace{\frac{1}{d_{00} e^{9\hat{\sigma}^2/4}} \int_0^{+\infty} \beta_p e^{-\frac{d_{\zeta t}^2}{\beta^2}} N(\beta_p; \vec{x}, t) d \beta_p}_{K_1(d^*)} \\
 &= \alpha_2 \rho_2 \left(\frac{u_{1,i} - u_{\infty,i}}{\tau_{drag}(d_{00})} \right) K_1(d^*)
 \end{aligned} \tag{4.87}$$

et enfin en utilisant la relation (4.52), $\mathbf{F}_{d,i}$ s'écrit simplement :

$$\mathbf{F}_{d,i} = \alpha_2 \rho_2 \left(\frac{u_{1,i} - U_{2,i}}{\tau_{drag}(d_{00})} \right) \frac{K_1(d^*)}{K_3(d^*)} \tag{4.88}$$

où $K_1(d^*)$ représente une fonction adimensionnelle que l'on peut calculer à l'aide des relations (4.54) et (4.55) :

$$\begin{aligned}
 K_1(d^*) &= \frac{c_1}{2} (d^*)^{p_1} \exp \left(\left(\frac{(1+p_1)^2 - 9}{4} \right) \hat{\sigma}^2 \right) \left(1 - \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{(1+p_1)\hat{\sigma}}{2} \right) \right) \\
 &+ \frac{1}{2} \exp(-2\hat{\sigma}^2) \left(1 + \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{\hat{\sigma}}{2} \right) \right) \\
 &- \frac{c_2}{2} (d^*)^{p_2} \exp \left(\left(\frac{(1+p_2)^2 - 9}{4} \right) \hat{\sigma}^2 \right) \left(1 + \mathbf{Erf} \left(\frac{\ln(d^*)}{\hat{\sigma}} + \frac{(1+p_2)\hat{\sigma}}{2} \right) \right)
 \end{aligned} \tag{4.89}$$

On peut se demander comment une variation de τ_{conv} influe sur la valeur de la traînée. Si l'on considère tout d'abord $d^*(\tau_{conv})$, en développant, on obtient :

$$d^*(\tau_{conv}) = d_{00} * \left(\frac{18\mu_1}{\rho_2} \tau_{conv} \right)^{-1/2} \tag{4.90}$$

La fonction $d^*(\tau_{conv})$ est donc décroissante. On étudie ensuite la dérivée de $K_1(d^*)$,

il vient :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial K_1}{\partial d^*} &= \frac{1}{d_{00}e^{9\hat{\sigma}^2/4}} \frac{\partial}{\partial d^*} \int_0^{+\infty} \beta_p e^{-\frac{d_{St}^2}{\beta_p^2}} N(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p \\
 &= \frac{d_{St}^2}{d_{00}e^{9\hat{\sigma}^2/4}} \frac{\partial}{\partial d^*} \int_0^{+\infty} d^* e^{-d^{*2}} N(d^*; \vec{x}, t) dd^* \\
 &= \frac{d_{St}^2}{d_{00}e^{9\hat{\sigma}^2/4}} d^* e^{-d^{*2}} N(d^*; \vec{x}, t)
 \end{aligned} \tag{4.91}$$

Tous les termes de droite sont positifs, on peut donc en déduire que $K_1(d^*)$ est une fonction croissante et que, par conséquent, $K_1(\tau_{conv})$ est une fonction décroissante. Si l'on diminue τ_{conv} , la traînée augmente.

Finalement, les fermetures choisies ne dépendent que d'un seul paramètre à fixer par l'utilisateur, le temps convectif particulaire τ_{conv} qui permet de calculer 'd*' le rapport du diamètre local au diamètre limite séparant les comportements balistiques et particulaires et qui pilote les comportements dynamiques décorrélés de sous-maïlles.

Tenseur des contraintes dans l'équation de transport d' E_{QB}

Le terme $W_{QB} = \alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,i} \frac{F_{2,i}}{m_2} \rangle_2$ de l'équation (3.78) représente le travail des efforts extérieurs associé au mouvement décorrélé. C'est un terme qui peut être générateur ou destructeur d'énergie cinétique décorrélée.

Par consistance avec le modèle présenté en (4.75), ce terme s'écrit :

$$W_{QB} = -\frac{2}{\tau_{drag}} \alpha_2 \rho_2 E_{QB} - (P_{QB} \delta_{ij} - \tau_{2,ij}) \frac{\partial u_{2,i}}{\partial x_j} \tag{4.92}$$

Le premier terme de droite représente la destruction d' E_{QB} engendré par la traînée. Sous l'effet de la traînée, les particules ont tendance à aligner leur vitesse sur celle du gaz donc à gagner en corrélation.

Le second représente la production d' E_{QB} par compression. Un simple bilan volumique permet de comprendre que la densité d'énergie cinétique décorrélée augmente lorsque la densité des particules augmente.

Le troisième terme représente la production d' E_{QB} par cisaillement. Un écoulement cisailé est *de facto* un écoulement présentant une décorrélation de vitesse.

Le quatrième et dernier terme représente la dissipation d' E_{QB} à mettre en rapport avec la diffusion de la chaleur dans les équations de Navier-Stokes. Cela représente en quelque sorte la répansion isotrope des vitesses décorrélés due au transport par ces mêmes vitesses décorrélés.

4.4.6 Evaporation

L'équation (3.30) régit l'évolution de la température moyenne d'un nuage de particules mais ne donne pas d'information sur la variance de température dans le nuage. Cette information nécessiterait la résolution d'une équation de transport supplémentaire, ce qui alourdirait d'environ 15% les temps de calcul. De plus, la convection différenciée semble bien plus prédominante que la dispersion thermique étant donné le rapport entre les échelles spatiales caractéristiques de convection et d'évaporation dans les turbines à gaz.

En première approche, la dispersion locale de température sera donc négligée ($E_\Gamma = 0$) et la température considérée comme statistiquement uniforme.

Cette hypothèse ramène le problème d'évaporation au seul calcul du taux d'évaporation moyen d'un nuage de gouttes polydisperse de température moyenne uniforme.

Variation de masse

Pour une goutte isolée, le taux d'évaporation s'écrit [29] :

$$\frac{\partial m_2}{\partial t} = 4\pi d_2 \rho_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B}) \quad (4.93)$$

avec \mathbf{B} nombre de transfert de Spalding et \mathcal{D}_2 coefficient de diffusion moléculaire du fuel gazeux.

En appliquant la définition de la moyenne statistique (3.4) et en développant à l'aide de la définition des moments S_γ (4.36), le taux d'évaporation moyen s'écrit finalement :

$$\Gamma_2 = n_2 \left\{ \frac{\partial m_2}{\partial t} \right\}_2 = 4\pi \rho_2 \mathcal{D}_2 S_1 \ln(1 + \mathbf{B}) \quad (4.94)$$

Il reste à calculer la variation associée de surface.

La variation de masse peut aussi s'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_2}{\partial t} &= \frac{\partial (\rho_2 \pi d_2^3 / 6)}{\partial t} \\ &= 3\rho_2 \pi d_2^2 / 6 \frac{\partial d_2}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.95)$$

ce que l'on réarrange pour obtenir la variation temporelle de surface en fonction de la variation de masse :

$$\begin{aligned} \frac{2}{d_2} \frac{\partial m_2}{\partial t} &= \rho_2 \pi d_2 \frac{\partial d_2}{\partial t} \\ &= \frac{\rho_2}{2} \frac{\partial \sigma_2}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.96)$$

Et enfin, combinée à (4.93), cette dernière expression donne le taux de variation de surface d'une particule due à l'évaporation :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma_2}{\partial t} &= \frac{4}{\rho_2 d_2} \frac{\partial m_2}{\partial t} \\ &= 16\pi \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B})\end{aligned}\quad (4.97)$$

Pour passer à la formulation polydisperse, l'équation (3.66) donne la forme du terme source moyen à calculer :

$$\begin{aligned}\Gamma_s &= n_2 \left\{ \frac{d\sigma_2}{dt} \right\}_2 \\ &= 16\pi n_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B})\end{aligned}\quad (4.98)$$

Il reste à déterminer l'influence de l'évaporation sur la QDM et l'enthalpie au travers des termes $\Gamma_{u,i}$ et Γ_h .

Variation de QDM

En utilisant l'équation (4.93), $\Gamma_{u,i}$ se développe simplement :

$$\begin{aligned}\Gamma_{u,i} &= n_2 \left\{ u_{2,i} \frac{dm_2}{dt} \right\}_2 \\ &= n_2 \{ u_{2,i} 4\pi d_2 \rho_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B}) \}_2 \\ &= n_2 4\pi \rho_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B}) \int c_{p,i} \beta_p f_2 dc_{p,i} d\zeta_p d\beta_p\end{aligned}\quad (4.99)$$

Puis en combinant la propriété (4.13) avec la définition (4.47), on obtient :

$$\begin{aligned}\Gamma_{u,i} &= n_2 4\pi \rho_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B}) \int u_{\tau,i} \beta_p N(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p \\ &= n_2 4\pi \rho_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B}) \left[u_{1,i} S_1 + (u_{\infty,i} - u_{1,i}) \int_0^{+\infty} \beta_p e^{-\frac{d_{st}^2}{\beta_p^2}} N(\beta_p; \vec{x}, t) d\beta_p \right] \\ &= n_2 4\pi \rho_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B}) \left[u_{1,i} S_1 + (u_{\infty,i} - u_{1,i}) d_{00} e^{(3\hat{\sigma}/2)^2} K_1(d^*) \right] \\ &= n_2 4\pi \rho_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B}) \left[u_{1,i} S_1 + (U_{2,i} - u_{1,i}) d_{00} e^{(3\hat{\sigma}/2)^2} \frac{K_1(d^*)}{K_3(d^*)} \right] \\ &= n_2 4\pi \rho_2 \mathcal{D}_2 \ln(1 + \mathbf{B}) S_1 \left[u_{1,i} + (U_{2,i} - u_{1,i}) e^{(2\hat{\sigma}^2)} \frac{K_1(d^*)}{K_3(d^*)} \right]\end{aligned}\quad (4.100)$$

Enfin, en incorporant l'expression de Γ_2 (4.94), il vient :

$$\Gamma_{u,i} = \Gamma_2 \left(u_{1,i} + (U_{2,i} - u_{1,i}) \frac{K_1(d^*)}{K_3(d^*)} e^{(2\hat{\sigma}^2)} \right) \quad (4.101)$$

Variation d'enthalpie

Comme θ_Γ est choisi indépendant de d_2 , l'expression de Γ_h s'écrit simplement :

$$\Gamma_h = \Gamma_2 h_2 \quad (4.102)$$

4.5 Retour à l'état monodisperse

En l'absence de croisement de jets de particules, la variance de diamètre d'un nuage polydisperse ne peut que diminuer à partir de sa valeur d'injection sous l'effet séparateur de la traînée.

Pour appréhender le phénomène, un exemple de séparation est représenté à la Fig. 4.10. Un nuage initialement polydisperse est transformé en spray localement monodisperse par l'effet d'une traînée transverse. Le schéma montre trois étapes discrètes de l'évolution temporelle et spatiale du nuage initial (appelé aussi nuage 'père'). Le nuage père '1' se sépare en deux nuages fils. Le premier '11' est constitué uniquement de gouttes à fort Stokes, et le second '12' est encore polydisperse. La dispersion des diamètres a diminué dans chaque nuage fils et implique que $\hat{\sigma}_{injection} = \hat{\sigma}_1 > \hat{\sigma}_{12} > \hat{\sigma}_{11} = 0$.

La deuxième séparation ($12 \Rightarrow 121 + 122$) aboutit à l'état final monodisperse pour lequel $\hat{\sigma}_{11} = \hat{\sigma}_{121} = \hat{\sigma}_{122} = 0$.

Il arrive parfois, dans les calculs, que l'on obtienne un résultat différent de celui attendu (Fig. 4.10). Cela est dû à deux phénomènes (l'un numérique, l'autre physique) liés aux opérateurs de traitement des fronts (*cf* section 5.5 pour de plus amples détails). Cela pose un problème car, une fois que la variance s'est mise à augmenter au lieu de diminuer, le phénomène a tendance à parasiter le calcul tout autour des zones de gradients.

Pour essayer de comprendre ce phénomène d'augmentation inopportun (et donc de pouvoir le limiter), on peut reprendre les équations qui régissent l'évolution du diamètre et de la variance, (4.43) et (4.44), et étudier sous quelle(s) condition(s) ces deux quantités doivent diminuer simultanément :

$$\begin{cases} -\frac{2J_1}{3\alpha_2} + \frac{3J_2}{2\Sigma_2} - \frac{5J_3}{6n_2} < 0 \\ \frac{2J_1}{3\alpha_2} - \frac{J_2}{\Sigma_2} + \frac{J_3}{3n_2} < 0 \end{cases} \quad (4.103)$$

Par simple sommation des deux conditions, ce système se simplifie aisément en :

$$\frac{J_2}{2\Sigma_2} - \frac{J_3}{2n_2} < 0 \quad (4.104)$$

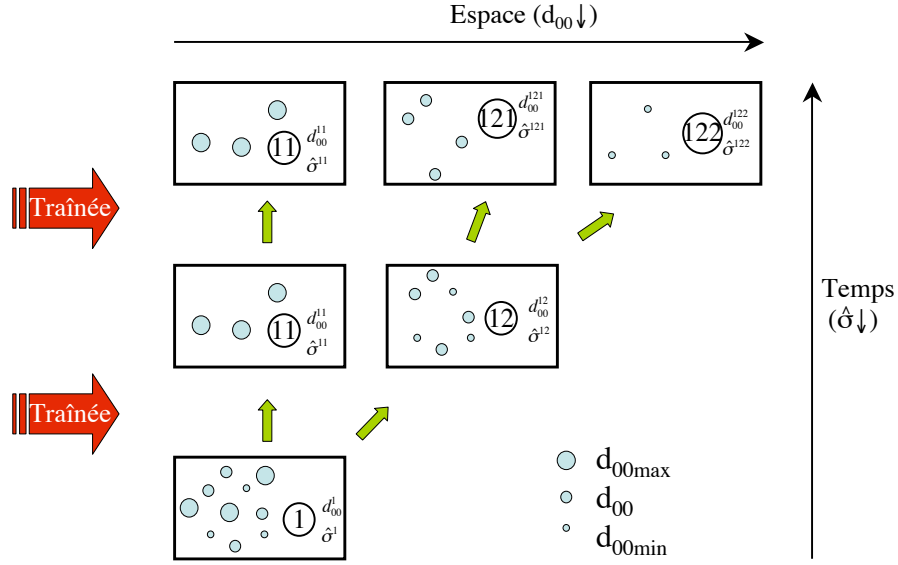


FIG. 4.10 – Schéma représentatif de la séparation de diamètre

puis en

$$\frac{J_2}{\Sigma_2} < \frac{J_3}{n_2} \quad (4.105)$$

Ainsi, en substituant les valeurs des termes J_i (4.41) et en absence d'évaporation, il apparaît qu'une diminution simultanée du diamètre et de la variance n'est possible que si

$$\frac{\mathbb{T}(\sigma_2)}{\Sigma_2} > \frac{\mathbb{T}(1/m_2)}{n_2} \quad (4.106)$$

En utilisant les fermetures proposées en (4.68) et (4.72), la condition est réécrite en :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(1 - \frac{K_2(d^*)}{K_3(d^*)} \right) > \frac{\partial}{\partial x_i} \left(1 - \frac{K_0(d^*)}{K_3(d^*)} \right) \quad (4.107)$$

Cependant, en raison de la complexité des fonctions $K_i(d^*)$ qui font apparaître des termes particulièrement non-linéaires, il est très difficile d'interpréter ce résultat analytique. En effet, il faudrait pouvoir évaluer, et surtout interpréter, le signe des gradients des rapports de fonctions $K_i(d^*)$ en fonction des gradients locaux de d_{00} et $\hat{\sigma}$. On propose donc une approche basée sur des raisonnements physiques en cherchant à définir quelle serait la variance donnée par l'écoulement réel et à s'en approcher.

Restriction de la variance selon des considérations physiques

Dans la description par PDF présumée, il existe une probabilité non nulle de présence de tout diamètre fini. Dans un écoulement réel, il existe un diamètre maximal. Ainsi, si la variance est trop élevée, elle permet des probabilités non négligeables de diamètres non réels.

Certaines formes présumées particulières de PDF limitent naturellement les valeurs des probabilités des diamètres extrêmes [3]. Mais ces PDF ne possèdent pas les propriétés mathématiques nécessaires pour une intégration analytique des moments comme le permet la loi log-normale.

On va donc chercher à mimer différemment la limitation des probabilités des diamètres extrêmes.

L'idée de base est que la variance locale ne peut pas permettre de dépasser localement les diamètres extrêmes injectés. En effet, la variance permet d'évaluer dans un nuage polydisperse l'écart moyen au diamètre moyen. Cela conduit donc à évaluer une borne supérieure de la variance en chaque point et à chaque instant.

En pratique, la première étape consiste à définir un diamètre maximal local 'représentatif' puisque, comme indiqué au début de ce paragraphe, il n'existe pas en théorie de vrai maximum.

On sait d'après (4.10) qu'en chaque point plus de 99.5% des gouttes ont un diamètre inférieur à la valeur d_{2max} définie selon :

$$d_{2max}(\hat{\sigma}) = d_{00} \exp(2\hat{\sigma}) \quad (4.108)$$

La valeur d_{2max} est donc choisie comme diamètre local maximal représentatif. Cette relation est également valable au(x) point(s) d'injection. Plus de 99.5% des gouttes ont un diamètre inférieur à d_{2max_inj} défini selon :

$$d_{2max_inj} = d_{00injection} \exp(2\hat{\sigma}_{injection}) \quad (4.109)$$

avec $d_{00injection}$ diamètre moyen d'injection et $\hat{\sigma}_{injection}$ variance à l'injection.

Or, dans tous les cas où la condensation est négligée, le diamètre maximal à l'injection est également le diamètre maximal dans tout le domaine étudié.

Ainsi, on peut affirmer qu'en chaque point, pour chaque particule, on doit avoir :

$$d_2 \leq d_{2max}(\hat{\sigma}) \leq d_{2max_inj} \quad (4.110)$$

Grâce à l'égalisation des relations (4.108) et (4.109), la valeur notée $\hat{\sigma}_{max1}$ définie telle

que $d_{2max}(\hat{\sigma}_{max1}) = d_{2max_inj}$ est donnée par :

$$\hat{\sigma}_{max1} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{d_{2max}}{d_{00}} \right) \quad (4.111)$$

$$= \hat{\sigma}_{injection} + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{d_{00injection}}{d_{00}} \right) \quad (4.112)$$

De même, on cherche à définir le diamètre local minimal représentatif.

Toujours d'après l'équation (4.10), plus de 99.5% des gouttes ont aussi un diamètre supérieur à la valeur d_{2min} définie selon :

$$d_{2min}(\hat{\sigma}) = d_{00} \exp(-2\hat{\sigma}) \quad (4.113)$$

et d_{2min} est choisi comme diamètre local minimal représentatif.

Cette relation est également valable au(x) point(s) d'injection. Plus de 99.5% des gouttes ont un diamètre supérieur à d_{2min_inj} défini selon :

$$d_{2min_inj} = d_{00injection} \exp(-2\hat{\sigma}_{injection}) \quad (4.114)$$

Ainsi, en incluant (4.110), on peut affirmer qu'en chaque point, pour chaque particule, on doit avoir :

$$d_{2min_inj} \leq d_{2min}(\hat{\sigma}) \leq d_2 \leq d_{2max}(\hat{\sigma}) \leq d_{2max_inj} \quad (4.115)$$

La deuxième valeur limitante $\hat{\sigma}_{max2}$ vérifiant $d_{2min}(\hat{\sigma}_{max2}) = d_{2min_inj}$ en est déduite :

$$\hat{\sigma}_{max2} = \hat{\sigma}_{injection} - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{d_{00injection}}{d_{00}} \right) \quad (4.116)$$

Au final, la condition la plus limitante entre (4.112) et (4.116) est retenue et, afin de capturer le retour à l'état monodisperse, $\hat{\sigma}$ est seuillé à la valeur :

$$\hat{\sigma} = \min(\hat{\sigma}, \hat{\sigma}_{max1}, \hat{\sigma}_{max2}) \quad (4.117)$$

Ce seuillage limite les valeurs possibles de $\hat{\sigma}$ et permet de redéfinir les probabilités de présence des diamètres extrêmes.

Une représentation visuelle de l'effet du seuillage est proposée à la Fig. 4.11. La valeur de $\hat{\sigma}$ obtenue conduit à une probabilité trop importante pour des particules dont le diamètre est inférieur au diamètre d'injection (zone hachurée). Afin de corriger cet effet, la largeur de la loi log-normale est réduite selon la règle (4.117) et la probabilité de dépasser le diamètre d'injection devient inférieur à 0.5%.

Comme à variance nulle, les flux décorrélés sont par définition nuls, la relation (4.117) qui contrôle la diminution de $\hat{\sigma}$ contrôle également l'extinction des flux décorrélés

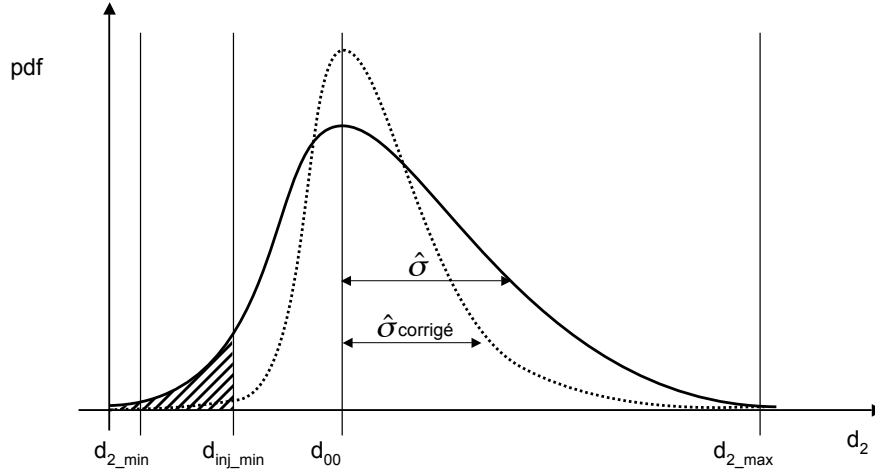


FIG. 4.11 – Représentation graphique du seuillage

et permet le retour à l'état monodisperse. De plus, elle permet de faire disparaître simplement les problèmes de variance trop importante. Ce modèle n'est cependant pas valable dans le cas où il existe plusieurs sources distinctes de particules présentant des variances et des diamètres différents. L'influence du seuillage de $\hat{\sigma}$ est discuté à la section 6.3.

Prédiction-Correction

Cependant, $\hat{\sigma}$ n'est pas une des grandeurs descriptives retenues. Pour ne pas perdre de masse ni de particules, la seule grandeur modifiable pour prendre en compte la valeur de $\hat{\sigma}$ corrigée est la densité de surface Σ_2 . Cela revient à modifier la répartition des diamètres sans modifier la masse totale ni le nombre de particules. Σ_2 est alors corrigée en :

$$\Sigma_2 = \frac{1}{d_{00}} \alpha_2 e^{-(5/4 \hat{\sigma}_{\text{corrigé}}^2)} \quad (4.118)$$

avec $\hat{\sigma}_{\text{corr}}$ la variance corrigée selon la relation (4.117).

4.6 A propos de l'effet de la turbulence du fluide porteur sur la phase dispersée

La phase continue bénéficie d'une grande antériorité au niveau de la description des écoulements turbulents et propose de nombreux modèles pour prendre en compte les effets instationnaires. La phase dispersée, quant à elle, est insensible au couplage entre la turbulence gazeuse et la traînée tant que la particule reste petite face à l'échelle de coupure de l'énergie cinétique turbulente. Les cas tests présentés au chapitre 5 vérifient cette hypothèse et par conséquent, aucun terme de correction n'est appliqué dans les équations.

Dans les cas où cette hypothèse ne se vérifie pas, même si les termes supplémentaires qui apparaissent lors du double filtrage de la phase dispersée ont été identifiés [27], leur interprétation, et encore plus leur modélisation, reste délicate. L'évaluation de l'influence de cette hypothèse est un axe de développement encore peu exploré et cette influence n'est pas prise en compte ici.

Deuxième partie

**METHODES NUMERIQUES ET
SIMULATIONS**

Table des Matières

5	Code de calcul AVBP_TPF	105
5.1	Présentation	105
5.2	Schémas numériques	105
5.3	Conditions aux limites	107
5.3.1	Conditions aux limites sur la phase dispersée	107
5.3.2	Conditions aux limites sur la phase continue	107
5.3.3	Simulation d'injection de turbulence	108
5.4	Reconstitution de grandeurs et transport	110
5.5	Opérateurs de traitement des fronts et conséquences en polydisperse	111
6	Cas de validation théorique : spray liquide en soufflage transverse	113
6.1	Solution analytique	113
6.2	Configuration	116
6.3	Résultats	116
7	Comparaison calcul/expérience : configuration Sommerfeld-Qiu	127
7.1	Configuration	128
7.2	Résultats	130
7.2.1	Cas A	130
7.2.2	Cas B	148
8	Application à un cas industriel : VESTA	153
8.1	Configuration	153
8.2	Résultats	157

TABLE DES MATIÈRES

Chapitre 5

Code de calcul AVBP_TPF

5.1 Présentation

Les simulations numériques de ce travail ont été réalisées avec le solveur AVBP_TPF. Ce code de calcul compressible développé par le CERFACS est directement issu d'AVBP et résout de façon explicite les équations diphasiques en deux et trois dimensions pour des écoulements stationnaires et instationnaires (Schönfeld[13], Colin [9]...).

AVBP_TPF permet le traitement des maillages structurés, non structurés et hybrides avec des éléments prismatiques ou tétraédriques. Le code est parallélisé et portable sur un grand nombre de plates-formes parallèles (Compaq Alpha Server, Silicon Graphics, SUN...). La librairie COUPL (Cerfacs and Oxford University Parallel Library) gère les opérations de tableaux en parallèle. Les routines sont écrites dans les formats standards de FORTRAN 77 mais des extensions en langage C et FORTRAN 90 sont nécessaires pour permettre une gestion dynamique des tableaux.

5.2 Schémas numériques

Dans le cas d'un calcul LES, les schémas numériques doivent être capables de convecter les échelles turbulentes sur une large gamme de fréquences, c'est-à-dire pour les petites comme pour les grandes échelles avec des erreurs de dissipation et de dispersion les plus faibles possibles.

De plus, les relations entre les moments transportés de la PDF de taille de gouttes sont telles que pour les conserver les erreurs de dispersion du schéma doivent être très faibles. Or, l'erreur de dispersion aux hautes fréquences est importante pour

des schémas de types différences finies centrées et volumes finis. La Fig. 5.1 montre les erreurs de reconstruction engendrées par les schémas Lax-Wendroff et centré Runge-Kutta trois étapes sur la convection d'une gaussienne monodimensionnelle. Le domaine est périodique et les résultats sont présentés après 25 temps convectifs. On constate qu'avec ces deux schémas le diamètre reconstruit d'après la relation (4.38) est très dégradé. Un troisième schéma numérique d'ordre 3 en espace et en temps est également implanté dans le code AVBP_TPF spécifiquement pour la LES. Il s'agit du schéma éléments-finis TTGC [9]. Ce schéma de type Taylor-Galerkin est peu dissipatif et peu dispersif et permet d'obtenir des résultats plus précis que ceux obtenus avec le schéma Lax-Wendroff et centré Runge-Kutta. La Fig. 5.1 montre que ce schéma conserve de façon quasi-exacte la valeur du diamètre.

En raison de la dissipation trop importante du schéma Lax-Wendroff et malgré un

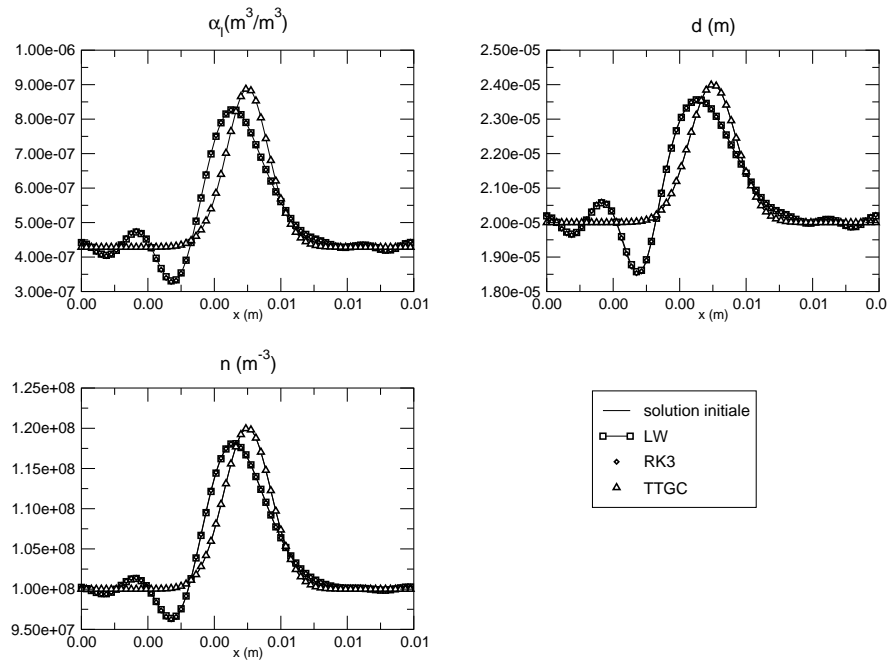


FIG. 5.1 – Erreur de transport selon le un schéma employé

coût plus faible, ainsi que des effets dispersifs du schéma Runge-Kutta pour un coût de calcul équivalent, c'est le schéma TTGC qui a été retenu pour les simulations présentées à ce chapitre.

5.3 Conditions aux limites

5.3.1 Conditions aux limites sur la phase dispersée

Contrairement à la phase continue, la phase dispersée n'est pas compressible au sens de la phase gazeuse et ne nécessite pas de prise en compte d'effets acoustiques pour le traitement des conditions aux limites. Les grandeurs sont simplement imposées sur la condition d'entrée et convectées sans traitement particulier au niveau de la sortie. Les murs sont considérés comme glissants et imperméables (vitesse normale, gradients de masse, de densité de particules et d'enthalpie nuls).

Le vecteur solution contient respectivement les quantités α_2 , $\alpha_2 \vec{U}_2$, $\alpha_2 E_{QB}$, $\alpha_2 H_2$, Σ_2 et n_2 . Cependant les variables imposées aux limites sont d_{00} , \vec{U}_2 , T_2 , $\hat{\sigma}$ et n_2 .

Pour chacune de ces quantités, décrites de façon générique sous l'appellation Ψ , la valeur imposée à la frontière à l'instant t est :

$$\Psi^t = \Psi^{t-1} + k_\Psi (\Psi_{cible} - \Psi^{t-1}) \quad (5.1)$$

avec Ψ_{cible} valeur cible et k_Ψ un coefficient de relaxation spécifique à la grandeur Ψ , imposé par l'utilisateur et qui conditionne la vitesse de convergence vers la consigne.

5.3.2 Conditions aux limites sur la phase continue

Une attention particulière est exigée dans l'écriture des conditions aux limites pour un code compressible, particulièrement pour des méthodes LES ou DNS. Les schémas numériques peuvent fournir une précision d'ordre élevé et une faible dissipation numérique. Cependant, cette précision dépend fortement de la qualité des CL. Dans la plupart des simulations DNS, des conditions périodiques sont généralement employées. Le domaine est alors infini et aucune condition aux limites n'est requise. La LES nécessite quant à elle, l'emploi de conditions d'entrées, de sorties et de murs pour la simulation de problèmes concrets. Ainsi, le bruit, tant acoustique que numérique devient un élément préoccupant. En cherchant à imposer 'en dur' les valeurs aux limites, les équations Navier-Stokes aux bords ne sont pas résolues, et les phénomènes acoustiques ne sont pas correctement traités. Aucun contrôle sur ces derniers n'est alors possible.

Les conditions dites 'Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions' (NSCBC) permettent de laisser sortir les ondes acoustiques tout en imposant une valeur moyenne. La démarche pour spécifier les conditions aux limites est d'exprimer l'amplitude des ondes entrantes comme si le problème était localement monodimensionnel et non visqueux (Poinsot & Lele [51]).

Par ailleurs, dans le cas d'écoulement diphasique, le gradient de pression local est

pondéré par la fraction volumique de particules. Cela implique également une influence sur la vitesse du son locale [12] et donc sur la formulation des conditions NSCBC. Cependant, comme cet effet reste très mineur pour des faibles fractions volumiques et des faibles gradients de fraction volumique de liquide [27], comme dans tous les cas étudiés ici, il n'est pas pris en compte.

5.3.3 Simulation d'injection de turbulence

L'objectif de la LES est de résoudre explicitement les fluctuations turbulentes de grande échelle. Cependant, au voisinage de l'entrée, la turbulence ne peut s'établir spontanément dans le domaine que par des mécanismes de production tels que cisaillement ou cascade énergétique. Ces mécanismes naturels peuvent être insuffisants et il est parfois nécessaire de générer des fluctuations de vitesse en entrée.

Pour ce faire, deux voies sont possibles, la première consiste à simuler un domaine suffisamment long en amont afin de laisser la turbulence s'établir 'naturellement' et atteindre les niveaux souhaités. Cette approche, envisagée par [49] [65], nécessite un coût supplémentaire de calcul non négligeable et surtout un maillage très fin afin de capturer les effets transitoires entre écoulement en conduite laminaire et turbulent.

La deuxième possibilité consiste à perturber l'écoulement dès l'entrée et de façon artificielle avec une déstabilisation adaptée. Une turbulence pleinement développée s'établit alors rapidement permettant de recoller rapidement aux niveaux de fluctuation expérimentaux. Cette déstabilisation est obtenue en superposant les modes d'un champ turbulent homogène isotrope à l'écoulement moyen en entrée du domaine de calcul.

La méthode employée ici est basée sur les travaux de Kraichnan (1970) qui décrit un champ $\vec{v}_{turb}(\vec{x}, t)$ homogène et isotrope comme une superposition de fonctions harmoniques :

$$v_{turb,i}(x_i, t) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^N [p_i^n \cos(\Psi_j) + q_i^n \sin(\Psi_j)] \quad (5.2)$$

avec

$$\Psi_j = K_j^n \left(\frac{v'}{v'_{(j)}} \right) \tilde{x}_j + \omega_n \tilde{t} \quad (5.3)$$

$$p_i^n = \varepsilon_{ijm} \zeta_j^{(n)} K_m^{(n)} \quad q_i^n = \varepsilon_{ijm} \xi_j^{(n)} K_m^{(n)} \quad (5.4)$$

et les fonctions ζ , ξ , ω et K prises selon

$$\zeta_j^{(n)} \in G(0, 1), \quad \xi_j^{(n)} \in G(0, 1), \quad \omega_n \in G(0, 1), \quad K_i^n \in G(0, 1/2) \quad (5.5)$$

où, $\tilde{x}_j = x/l$ et $\tilde{t} = t/\tau$ sont les échelles caractéristiques adimensionnées de longueur et de temps et $v' = l/\tau$ est la fluctuation de vitesse. ε_{ijm} est le tenseur de permutation utilisé dans l'opération de produit vectoriel, et $G(M, \sigma)$ est une distribution gaussienne de moyenne M et d'écart type σ . Les nombres K_j^n et ω_n représentent un échantillonnage de n vecteurs d'ondes et n fréquences du spectre de turbulence $E(K)$. Ce spectre est défini selon l'Eq. (5.6) et est représenté sur la figure (5.2) en ligne continue.

$$E(k) = 16 (2/\pi)^{1/2} K^4 e^{-2K^2} \quad (5.6)$$

$K=2\pi/l_t$ est le nombre de modes et l_t l'échelle de longueur turbulente. K est réparti

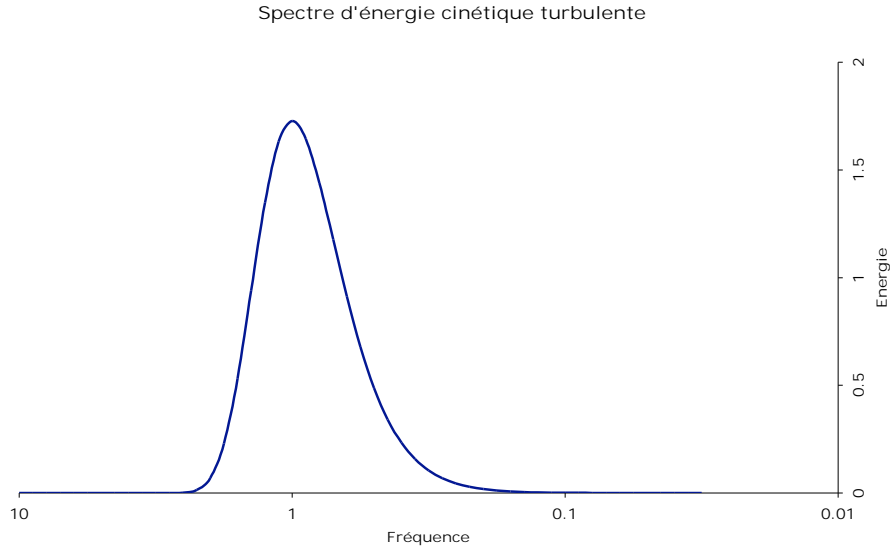


FIG. 5.2 – Spectre modélisé d'énergie cinétique turbulente

de façon aléatoire selon une distribution gaussienne de variance K_e , où K_e est le vecteur nombre d'onde du tourbillon le plus énergétique injecté en entrée. l_e défini par $l_e=2\pi/K_e$ vaut approximativement un tiers de la dimension caractéristique de l'entrée. Un nombre d'onde de coupure K_{cutoff} détermine quant à lui la taille du plus petit tourbillon injecté en entrée. l_{cutoff} est généralement prise égale à deux fois la taille minimale de la cellule en entrée.

Cette méthode est employée sur la configuration Sommefeld-Qiu, Chapitre 5.

Le champ \vec{v}_{turb} généré par la méthode Kraichnan est à divergence nulle et le tenseur de corrélation correspondant est, par construction, diagonal :

$$\frac{\partial v_{turb,i}}{\partial x_i} = 0 \quad (5.7)$$

$$\overline{v_{turb,i} v_{turb,j}} = \delta_{ij} \quad (5.8)$$

Cependant, il semble évident que, pour une configuration LES quelconque, la turbulence est rarement isotrope. Le principe de la méthode est donc d'alimenter l'écoulement en structures de tailles multiples selon une répartition compatible avec la physique de la turbulence et de laisser la simulation élire les modes représentatifs et les transporter. Par cascade ou dissipation, on fait l'hypothèse que les structures non pertinentes disparaissent rapidement.

Cette procédure est implantée dans le code AVBP_TPF. Elle est appliquée à la condition aux limites caractéristiques d'entrée et nécessite de spécifier les paramètres suivants : N , le nombre de modes injectés en entrée, l_e , la taille du tourbillon le plus énergétique et l_{cutoff} , la taille du plus petit tourbillon.

5.4 Reconstitution de grandeurs et transport

La reconstruction du diamètre à partir des variables transportées est une opération délicate au niveau numérique. Une faible erreur de reconstitution due au choix de la relation de transport s'amplifie très vite au point de produire des résultats non physiques. Cette relation a dû être adaptée pour assurer une reconstruction précise.

Avant de présenter cette relation et afin de mieux appréhender les problèmes numériques rencontrés, l'explication du phénomène est présentée sur un cas monodimensionnel.

Un champ de particules initialement au repos porté par un gaz au repos est soumis à une petite perturbation relative de diamètre ϵ en un point indicé $i + 1$. Au point indicé i adjacent à la perturbation, une approche différence finie de la discrétisation des équations de transport donne respectivement pour α_2 , Σ_2 et n_2 après simplification :

$$\alpha_{2,i}^{n+1} = \alpha_{2,i}^n \left(1 + \frac{CFL}{2} ((1 + \epsilon)^3 - 1) \right) \quad (5.9)$$

$$\Sigma_{2,i}^{n+1} = \Sigma_{2,i}^n \left(1 + \frac{CFL}{2} ((1 + \epsilon)^2 - 1) \right) \quad (5.10)$$

$$n_{2,i}^{n+1} = n_{2,i}^n \quad (5.11)$$

avec n indice temporel et i indice spatial de la discrétisation et CFL le paramètre du critère de Courant-Friedrichs-Levy.

En reportant les expressions discrétisées de α_2 , Σ_2 et n_2 dans l'expression de définition de la variance (4.37) et en effectuant un développement limité d'ordre 2 de $\hat{\sigma}$

par rapport à ϵ , il vient :

$$\hat{\sigma}_i^{n+1} = \hat{\sigma}_i^n + \frac{CFL}{2} \left(1 - \frac{CFL}{2}\right) \epsilon^2 + o(\epsilon^2) \quad (5.12)$$

La CFL étant positive par définition, on constate que, quel que soit le signe de la variation de d_{00} , $\hat{\sigma}$ va dériver doucement vers des valeurs supérieures à sa valeur initiale. Ainsi, la variation relative de d_{00} provoque une erreur absolue sur $\hat{\sigma}$.

La solution qui a été envisagée pour résoudre cette dérive est de transporter non pas Σ_2 mais $d_{00}\Sigma_2$. L'équation de transport de $d_{00}\Sigma_2$ est obtenue à partir de l'équation de transport de $k\Sigma_2$ (3.67) en remplaçant k par d_{00} , :

$$\frac{\partial}{\partial t} d_{00}\Sigma_2 + \frac{\partial}{\partial x_i} d_{00}\Sigma_2 U_{2,i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} d_{00} \{ \sigma_2 u''_{2,i} \}_2 + \mathbb{C}(d_{00}\sigma_2) + n_2 d_{00} \left\{ \frac{d\sigma_2}{dt} \right\}_2 \quad (5.13)$$

Si l'on calcule la variance $\hat{\sigma}$ à l'aide de la relation :

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{5}{4} \ln \left(\frac{6\alpha_2}{d_{00}\Sigma_2} \right)} \quad (5.14)$$

Et que l'on effectue un développement limité d'ordre 2 de l'avancement de $\hat{\sigma}$ dans l'équation (5.13), on obtient cette fois-ci :

$$\hat{\sigma}_i^{n+1} = \hat{\sigma}_i^n + o(\epsilon^2) \quad (5.15)$$

Le terme d'ordre 2 a été éliminé et cette modification permet une précision suffisante pour éviter la propagation d'erreur sur la reconstruction de diamètre.

5.5 Opérateurs de traitement des fronts et conséquences en polydisperse

Les schémas centrés ont l'inconvénient de générer des oscillations au voisinage des discontinuités ou des forts gradients. Des termes de dissipation artificielle (Jameson [26]) peuvent être ajoutés pour lisser ces oscillations. Cependant, s'ils permettent une convection correcte des gros tourbillons, ils présentent une erreur dispersive pour les structures plus petites. Il est alors nécessaire d'utiliser une résolution du maillage plus fine sans quoi les erreurs commises sur la convection des grandes échelles seraient trop importantes.

Cette réduction de l'erreur par le raffinement du maillage implique une augmentation importante du coût CPU requis. Il s'agit donc de trouver un compromis

entre la taille minimale des cellules qui conditionne le pas de temps, le nombre de cellules et le temps nécessaire de calcul.

Par ailleurs, ces opérateurs sont pour l’instant de même nature pour le gaz que pour le liquide. En d’autres termes, on utilise la même opération locale de diffusion sur chaque phase mais avec des coefficients de diffusion distincts.

Cependant, l’opérateur de la phase dispersée n’est pas conçu pour conserver des relations aussi complexes que la reconstruction de diamètre (4.38) ou de variance (4.37).

Ainsi, dans les zones de fort gradient (typiquement sur les bords d’un jet liquide), cet opérateur induit des variations numériques de diamètre ou de variance. En raison de la présence d’une exponentielle de la variance dans les expressions de α_2 (4.31) et Σ_2 (4.32), on constate que l’erreur se reporte presque exclusivement sur la variance.

Le seuillage de $\hat{\sigma}$ améliore grandement les choses mais des artefacts peuvent persister (*cf* chapitre 6).

A ce phénomène numérique s’ajoute une conséquence physique. Pour le calcul, le ‘vide’ est rendu par des particules de très faible diamètre et très peu présentes que l’on utilise pour ‘meubler’ des zones non pertinentes. La diffusion de quantités telles que la fraction massique ou la densité de particules dans ces zones quasiment vides engendre la mise en présence artificielle de ‘particules de vide’ et de particules diffusées (présentant un diamètre en général largement supérieur à celui des particules de vide). On obtient donc localement un nuage hétéroclite, ce qui n’est qu’une autre façon de décrire l’obtention d’une variance élevée. Or, la diffusion de particules dans le ‘vide’ (au sens physique) n’engendre pas par nature une augmentation de la variance. C’est la façon dont le vide est rendu numériquement pour le calcul qui cause cette variation.

Ainsi, il faut avoir à l’esprit que l’opération de diffusion artificielle engendre dans les zones où elle est active une augmentation artificielle de la variance.

Chapitre 6

Cas de validation théorique : spray liquide en soufflage transverse

Le premier test de validation du transport polydisperse cherche à démontrer la capacité à obtenir un état final dont la construction est fortement due aux effets polydisperses. Le cas retenu est un cas de spray liquide en soufflage transverse. Des particules de tailles diverses sont injectées au même point avec la même vitesse (Fig. 6.1). Un écoulement gazeux transverse va peu à peu séparer les particules selon leur diamètre et les profils obtenus aux sections D et F vont permettre de comparer le code de calcul avec les trajectoires obtenues par intégration des équations d'une traînée de Stokes. Ce cas est à rapprocher des travaux de [88] dans le cas du jet plat polydisperse mais sans effet d'entraînement de la phase porteuse.

6.1 Solution analytique

Une résolution analytique de l'équation de la traînée de Stokes (2.12) sous l'hypothèse d'une vitesse gazeuse \vec{u}_s constante en temps et en espace donne la vitesse instantanée $\vec{V}^{(k)}$ en fonction de la vitesse d'injection \vec{V}^0 et la position $\vec{X}^{(k)}$ à chaque instant t en fonction de la position initiale \vec{X}^0 :

$$X_i^{(k)} = \tau_p^{(k)}(V_i^0 - u_{s,i}) \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_p^{(k)}}} \right) + u_{s,i}t + X_i^0 \quad (6.1)$$

$$V_i^{(k)} = u_{s,i} + (V_i^0 - u_{s,i}) e^{-\frac{t}{\tau_p^{(k)}}} \quad (6.2)$$

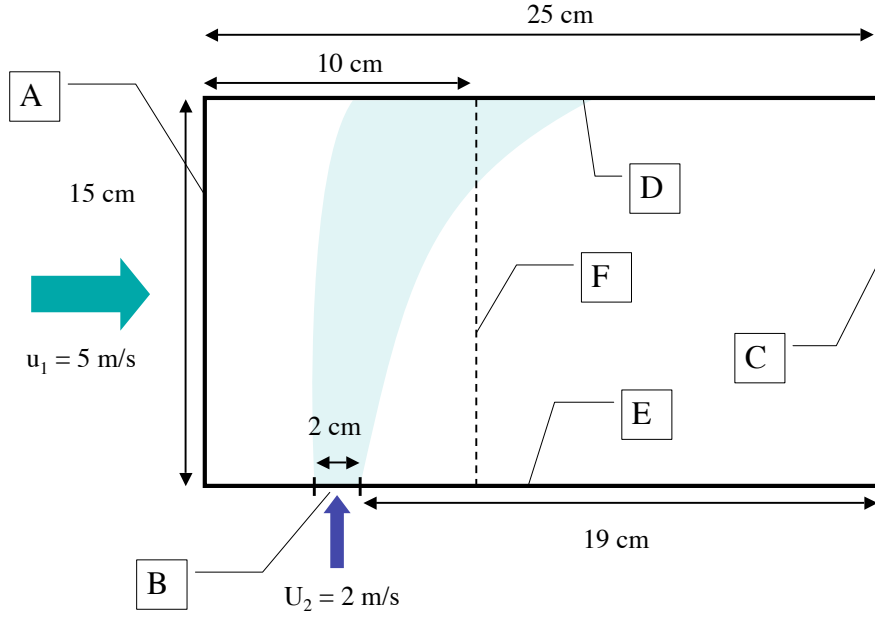


FIG. 6.1 – Configuration du test

Pour cette configuration, on choisit :

$$\begin{cases} V_x^0 = 0 \text{ m/s} \\ V_y^0 = 2 \text{ m/s} \end{cases} \quad \begin{cases} u_{s,x} = 5 \text{ m/s} \\ u_{s,y} = 0 \text{ m/s} \end{cases} \quad \begin{cases} X^0 = 0.05 \text{ m} \\ Y^0 = 0 \text{ m} \end{cases} \quad (6.3)$$

Ceci permet d'écrire le système simplifié suivant pour la position de la particule :

$$\begin{cases} X^{(k)} = -u_{s,x}\tau_p^{(k)} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_p^{(k)}}} \right) + u_{s,x}t + X^0 \\ Y^{(k)} = V_y^0\tau_p^{(k)} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_p^{(k)}}} \right) \end{cases} \quad (6.4)$$

On pose alors les coordonnées réduites :

$$\begin{cases} x^* = \frac{X^{(k)} - X^0}{u_{s,x}\tau_p^{(k)}} \\ y^* = \frac{Y^{(k)}}{V_y^0\tau_p^{(k)}} \end{cases} \quad (6.5)$$

Et le système (6.4) devient :

$$\begin{cases} x^* = \frac{t}{\tau_p^{(k)}} - 1 + e^{-\frac{t}{\tau_p^{(k)}}} \\ y^* = 1 - e^{-\frac{t}{\tau_p^{(k)}}} \end{cases} \quad (6.6)$$

La deuxième équation du système permet d'obtenir directement l'expression de t en fonction de y^* :

$$t = -\tau_p^{(k)} \ln(1 - y^*) \quad (6.7)$$

De cette expression, on tire l'expression des vitesses en fonction uniquement de la position y^* :

$$V_x^{(k)} = u_{s,x} (1 + \ln(1 - y^*)) \quad (6.8)$$

$$V_y^{(k)} = -V_y^0 \ln(1 - y^*) \quad (6.9)$$

Cette relation permet de définir les profils de vitesse à comparer en D et F une fois connus le diamètre et la position réduite y^* .

Il reste donc à définir les profils de diamètre en fonction de la position. En réinjectant l'expression (6.7) dans (6.6), on obtient $x^*(y^*)$:

$$x^* = -y^* - \ln(1 - y^*) \quad (6.10)$$

En introduisant la définition de $\tau_p^{(k)}$ (2.10), on peut en déduire $\vec{X}^{(k)}$ en fonction de $d_p^{(k)}$ pour

$$Y^{(k)} = Y^1 = 0.15m :$$

$$X^{(k)} = X^0 - u_{s,x} \left(Y^1 - \frac{\rho_p}{18\nu_1} d_p^{(k)2} \ln \left(1 - \frac{\rho_p d_p^{(k)2} Y^1}{18\nu_1 V_y^0} \right) \right) \quad (6.11)$$

Cette relation donne l'abscisse $X^{(k)}$ d'une particule arrivée en Y^1 en fonction de son diamètre $d_p^{(k)}$. Si on l'inverse numériquement, on obtient le diamètre attendu $d_p^{(k)}$ en fonction de la position d'arrivée $X^{(k)}(Y^1)$. C'est cette relation qui est utilisée pour valider les résultats donnés par le code de calcul en Fig. 6.2.

De même, afin de ne pas se limiter à un seul profil, on cherche à définir les ordonnées d'arrivée de particules en $X^{(k)} = X^1 = 0.01m$ en fonction de leur diamètre. Pour cela, on cherche à exprimer explicitement $Y^{(k)}$ en fonction de X^1 .

On fait l'hypothèse $y^* \ll 1$ dans (6.10). Une application numérique *a posteriori* donne des valeurs comprises entre $y^* = 0.11$ pour des particules de diamètre $1000\mu m$ et $y^* = 0.5$ pour des particules de diamètre $200\mu m$, justifiant l'hypothèse en première approche. Un développement limité en y^* à l'ordre 2 donne alors :

$$x^* \sim \frac{y^{*2}}{2} + o(y^{*2}) \quad (6.12)$$

Et en développant, on obtient :

$$Y^{(k)} \sim \frac{\rho_p}{3\nu_1} V_y^0 \sqrt{\nu_1 \frac{X^1 - X^0}{\rho_p u_{s,x}}} d_p^{(k)} \quad (6.13)$$

Cette relation donne l'ordonnée $Y^{(k)}$ d'une particule arrivée en X^1 en fonction de son diamètre $d_p^{(k)}$. Si on l'inverse, on obtient la relation qui est utilisée pour valider les résultats donnés par le code de calcul en Fig. 6.3 :

$$d_p^{(k)} \sim \left(\frac{\rho_p}{3\nu_1} V_y^0 \sqrt{\nu_1 \frac{X^1 - X^0}{\rho_p u_{s,x}}} \right)^{-1} Y^{(k)} \quad (6.14)$$

C'est un résultat intéressant et peu évident *a priori* pour ce type de configuration : pour $y^* \ll 1$, le long d'une verticale le diamètre varie linéairement.

6.2 Configuration

Le domaine fait $25cm \times 15cm$ et comporte 55000 noeuds. La maillage est régulier et constitué de quadrilatères. Les conditions limites sont répertoriées dans le tableau 6.2. Le code de calcul est utilisé en régime laminaire sans correction de Tchen sur la traînée.

Les paramètres physiques retenus pour ce cas sont :

- $\rho_2 = 750kg/m^3$
- $\nu_1 = 1.788.10^{-5}$
- $\tau_{drag}(d_{00}) \sim 0.75s$

Ce qui conduit aux valeurs suivantes des grandeurs adimensionnelles :

- $St(d_{00}) \sim 40$
- $d_{St} \sim 6$
- $Re_p(d_{00}) \sim 60$

La valeur retenue de τ_{conv} en première approche est $\sim 0.08s$

Les conditions limites sont répertoriées dans le tableau 6.2.

6.3 Résultats

Comparaison avec la solution analytique

Deux coupes sont effectuées respectivement sur la limite supérieure du domaine en $y = 0.15m$ (section D) et à droite du point d'injection en $x = 0.10m$ (section F).

Conditions limites :	Gaz	Liquide
Entrée gauche (A) :	relax sur $u_{1,n}, u_{1,t}$ et T_1	mur glissant
Valeurs imposées :	$u_1 = 5m/s, v_1 = 0m/s$	
Entrée basse (B) :	relax sur $u_{1,n}, u_{1,t}$ et T_1	relax sur $u_{2,n}, u_{2,t}, d_{00}, \hat{\sigma}$ et n_2
Valeurs imposées :	$u_1 = 5m/s, u_1 = 0m/s$	$U_2 = 0m/s, V_2 = 2m/s, d_{00} = 500\mu m, \hat{\sigma} = 0.3$
Sortie (C) :	relax sur p_1	convection pure
Valeurs imposées :	$p_1 = 101350Pa$	
Limites haute (D) :	adiabatique, glissant	convection pure
Limites basse (E) :	adiabatique, glissant	mur glissant

TAB. 6.1 – Résumé des conditions limites

Les résultats obtenus sont présentés respectivement sur les Figs. 6.2 et 6.3.

Les valeurs montrent un très bon accord sur les deux coupes tant au niveau des tendances que des valeurs. Les effets polydisperses sont très bien captés, on retrouve la décroissance de diamètre et l'entraînement progressif des particules par le gaz. La Fig. 6.3 permet de constater que non seulement le modèle permet d'atteindre l'état décrit par les équations analytiques mais qu'en plus le transitoire spatial est bien capté.

En s'intéressant aux détails, on note une légère sous-évaluation des vitesses (particulièrement pour $V_x^{(k)}$ sur la coupe $x = 0.1m$) et une meilleure prédiction des diamètres dans les zones où la fraction volumique des particules n'est pas trop faible.

Par ailleurs, la variance de diamètre présente sur la Fig. 6.2 trois pics dans les zones $x < 0.06$, $0.06 < x < 0.11$ et $x > 0.11$ et une annulation en $x = 0.06m$. Comme cette variance ($\hat{\sigma} = 0.2$ au niveau du pic) est inférieure à la variance d'injection ($\hat{\sigma}_{inj} = 0.3$), on peut supposer que ces pics sont physiques et ne sont pas des artefacts du genre de ceux que gère le seuillage de $\hat{\sigma}$. Cette hypothèse de pertinence physique n'est en fait valable que pour l'un des pics seulement.

En $x = 0.06$ la variance est nulle car seules les particules de diamètre extrême (ici $1350\mu m$) ont pu avoir une trajectoire aussi peu déviée par la traînée transverse et car le seuillage de $\hat{\sigma}$ empêche d'obtenir des diamètres plus élevés (ce seuillage impose en pratique $d_{00} < 1400\mu m$). Pour schématiser, on a des particules de diamètre inférieur à $1350\mu m$ qui ont déjà été déviées et il n'existe pas de particules de diamètre supérieur à $1350\mu m$. On est donc en présence uniquement de particules de diamètre égal à $1350\mu m$ et la variance est par conséquent nulle.

Pour la zone $0.06 < x < 0.16$, $\hat{\sigma}$ non nul correspond au fait que les particules pour lesquelles $St \geq 1$ ont tendance à avoir une trajectoire commune pendant un temps

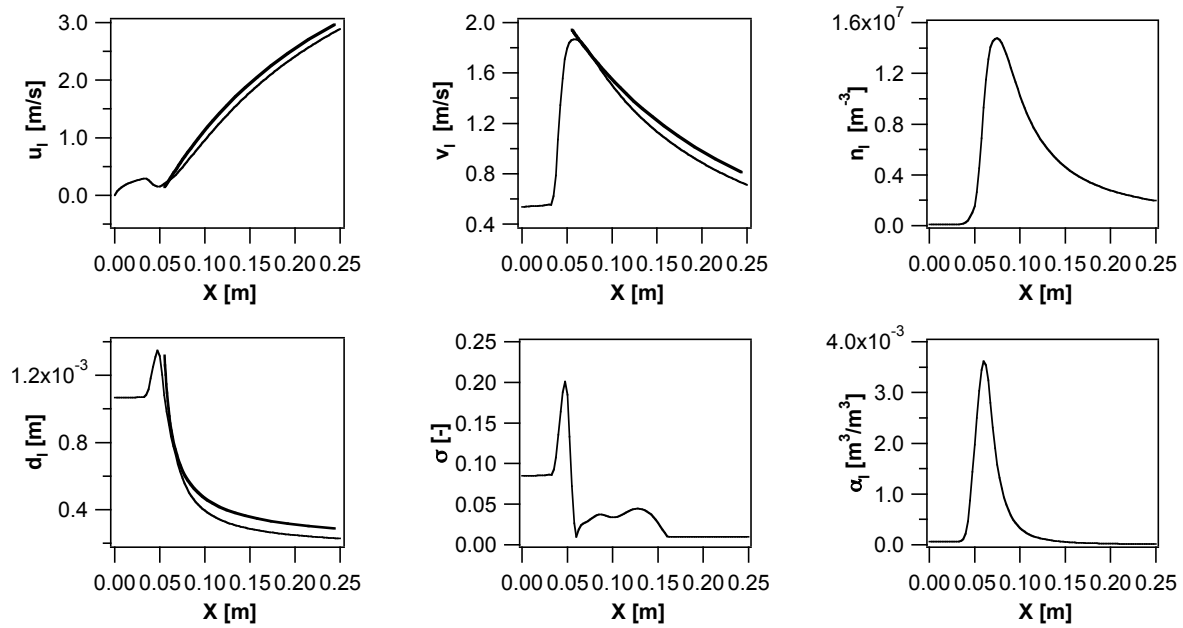


FIG. 6.2 – Validation du transport polydisperse en $y = 0.15\text{m}$.

(-) : analytique, (-) : AVBP_TPF

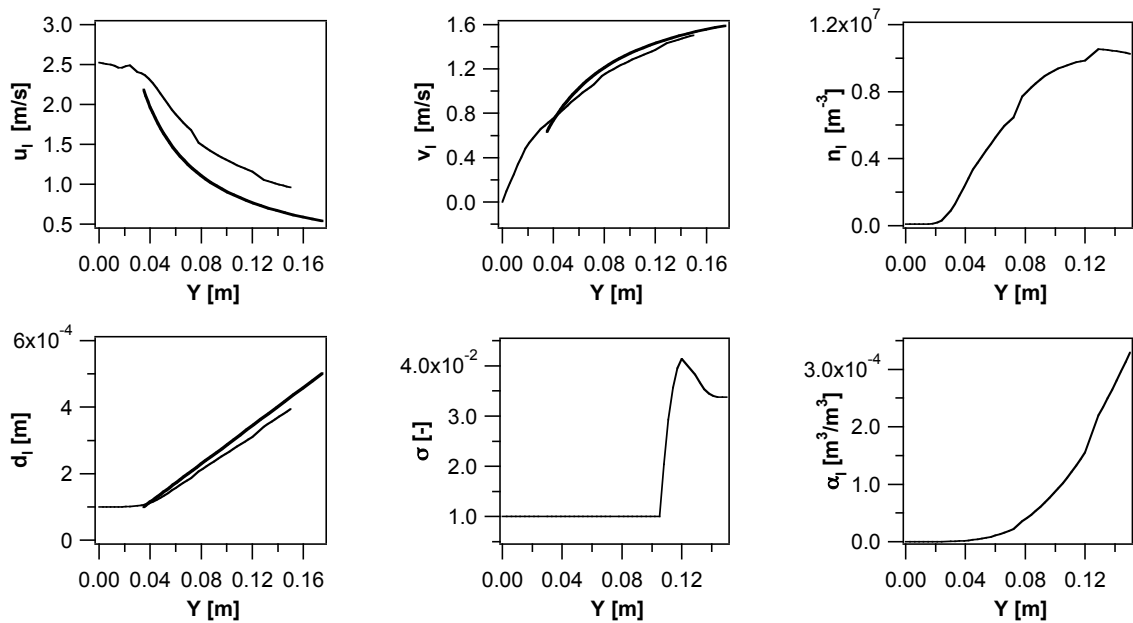


FIG. 6.3 – Validation du transport polydisperse en $x = 0.10\text{m}$

(-) : analytique, (-) : AVBP_TPF

'long' avant d'être séparées par la traînée transverse. On observe donc également pendant ce temps une variance non nulle qui, cependant, diminue selon y .

Pour la zone $x < 0.06$, il s'agit d'une création artificielle de variance due aux opérateurs de traitement de front. La raideur du profil de fraction massique de liquide en entrée de domaine met en action les opérateurs de viscosité artificielle. Ceux-ci diffusent toutes les grandeurs vers la gauche du domaine, sans traitement particulier pour respecter le diamètre ou la variance, engendrant artificiellement cette augmentation. De plus, la diffusion du diamètre entraîne la présence de plus petits diamètres sur la gauche du jet. Les particules associées à ces plus petits diamètres (créés de façon artificielle) vont être source de flux décorrélés tendant à les ramener vers la droite, raidissant par la même le pic de variance.

Il est également très probable que le pic de la zone $x > 0.11$ soit dû au même phénomène de diffusion mais cette fois-ci vers la droite avec un lissage provenant du transport bien physique des particules de faible diamètre déviées dans le sens de la vitesse gazeuse.

Si le seuillage de $\hat{\sigma}$ diminue fortement les problèmes de variance sur-prédite (cf section suivante), il peut rester des artefacts et c'est ce que l'on observe ici. Cependant, malgré ces surévaluations, les zones correspondantes du calcul ne sont pas pénalisées.

Influence du seuillage de $\hat{\sigma}$

Comme indiqué au chapitre 4, la variance de diamètre est seuillée par des considérations physiques pour limiter l'influence des diamètres non réels. Pour mieux comprendre l'influence de cette opération, le premier résultat présenté est une comparaison effectuée entre un cas avec et un cas sans seuillage. Les résultats comparatifs entre les deux cas à la section D du domaine ($y = 0.15m$) sont présentés à la Fig. 6.4.

On remarque que les valeurs correspondant à des diamètres inférieurs au diamètre caractéristique d'injection $d_{00inj} = 500\mu m$ ne sont pas influencées par le seuillage. Dans toute la zone $x > 0.06m$, les valeurs sont très proches avec ou sans seuillage. Par contre, l'influence de cette opération est essentielle sur la partie $x < 0.06m$. De nombreuses grandeurs ne sont pas correctement prédites. Dans toute cette zone, on devrait avoir des diamètres supérieurs au diamètre d'injection, croissant indéfiniment au fur et à mesure qu'on s'approche de l'abscisse d'injection $x = 0.05m$, mais on observe une quasi stagnation du diamètre à $900\mu m$. De même, la densité de particules présente une déficience avec un ressaut en $x = 0.06$ non prévu par l'analyse.

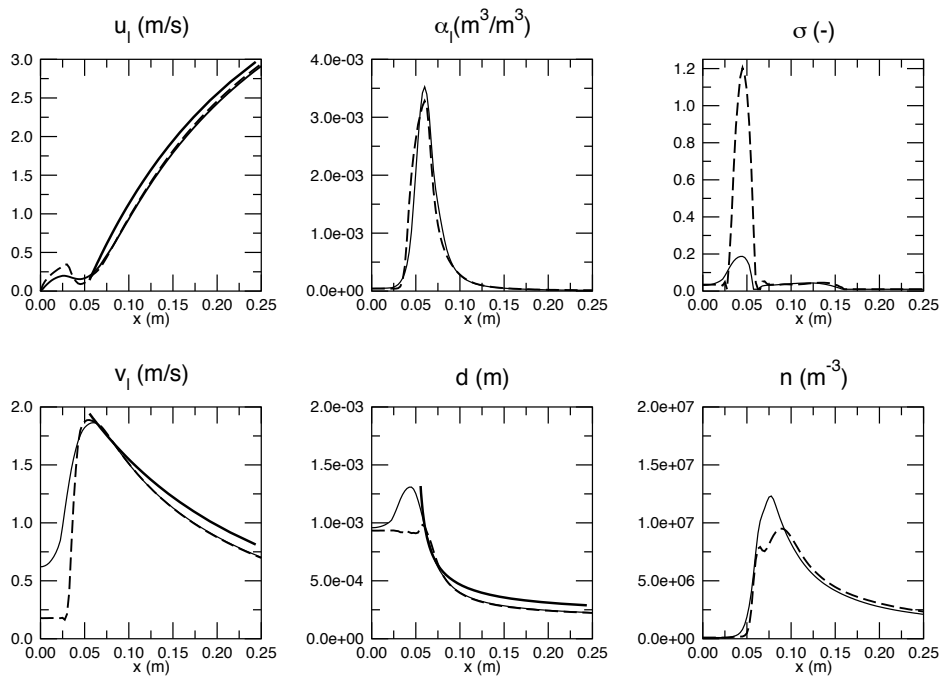


FIG. 6.4 – Influence du seuillage de $\hat{\sigma}$ ($y = 0.15m$)
 Solution analytique (- -), Calcul avec seuillage (—), Calcul sans seuillage (- - -).

Enfin, la variance maximale augmente d'un facteur 4 par rapport à la valeur injectée. Or, le cas physique impose une diminution de ce paramètre depuis le point d'injection dans tout le domaine (*cf* section 4.5). Comme la formulation des équations est conservative, l'augmentation de variance entraîne en réaction une sous-prédiction du diamètre (par conservation de la masse).

Toutes ces erreurs auraient une influence beaucoup plus importante en écoulement turbulent et surtout en cas réactif sur le champ de carburant liquide. La limitation de l'influence des diamètres non réels est donc nécessaire. De plus, l'opération de seuillage a un effet non seulement sur la variance mais sur toutes les autres grandeurs transportées. Elle permet de retrouver des comportements correspondant beaucoup mieux à la physique que l'on cherche à décrire. En ce sens, cette opération participe pleinement du modèle physique au delà des garde-fous numériques.

Sensibilité de l'écoulement aux paramètres du modèle

Afin d'évaluer la sensibilité du modèle aux paramètres fixés par l'utilisateur, une étude paramétrique a été conduite sur les coefficients de l'approximation de $e^{-\frac{d_{St}}{d_2}}$ et le paramètre τ_{conv} .

Les cas étudiés sont répertoriés dans le tableau 6.3.

Nom du cas	c_1	p_1	c_2	p_2	τ_{conv}
CAS A	0.39	3.27	0.8	-1.58	3.5d-2
CAS B	0.50	3.	0.50	-3.	35.5d-2
CAS C	0.50	2.	0.50	-2.	35.5d-2
CAS D	0.50	2.	0.50	-1.	3.5d-2
CAS E	0.50	3.	0.50	-1.	2.0d-2
CAS F	0.50	3.	0.50	-1.	1.0d-2
CAS G	0.50	3.	0.50	-1.	0.5d-2
CAS H	0.50	3.	0.50	-1.	4.0d-2
CAS I	0.50	3.	0.50	-1.	8.0d-2

TAB. 6.2 – Valeurs des paramètres d'étude pour les cas A à I

Les cas de A à E concernent l'influence des paramètres de la forme approchée de $\vec{u}_\tau(d_2)$.

Après l'étude de ces cinq cas, l'interpolation E, considérée comme la meilleure, est choisie pour étudier l'influence du paramètre τ_{conv} dans les cas F à I.

Les valeurs de c_1 , p_1 , c_2 et p_2 du cas E sont celles qui ont été retenues pour l'étude de la configuration Sommerfeld-Qiu et le brûleur VESTA (resp. chap. 7 et 8).

• Paramètres numériques : c_1 , p_1 , c_2 et p_2

Pour chaque interpolation testée (cas A à D), un paramètre τ_{conv} optimal a été déterminé selon l'adéquation entre le cas théorique et le cas simulé. Les résultats sont présentés uniquement pour cette valeur optimale (Fig. 6.5).

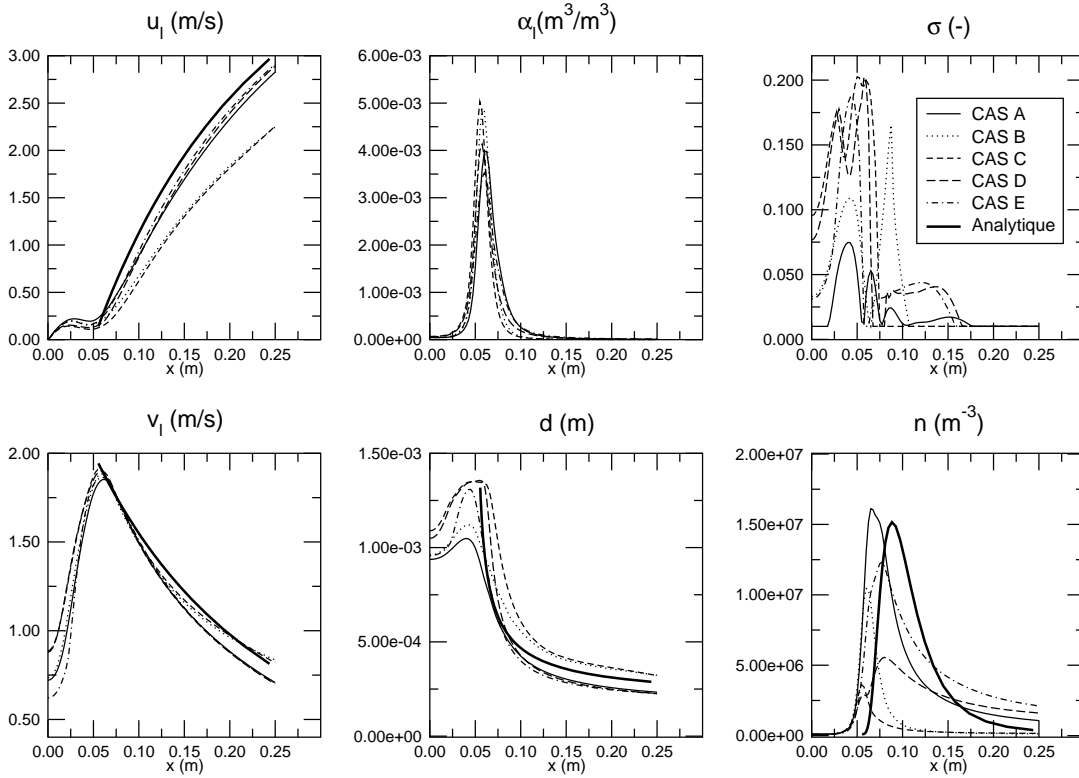


FIG. 6.5 – Etude des paramètres numériques

On remarque que les courbes conservent globalement la même allure quelles que soient les valeurs des constantes c_1 , p_1 , c_2 et p_2 . Par contre, la densité de particules fait apparaître des variations de position et d'amplitude de son maximum de 10 à 80%. Cela est dû au fait que, si la distribution de diamètres est la même pour chaque cas, changer l'allure de la répartition des vitesses dans $\vec{u}_\tau(d_2)$ au travers des coefficients c_1 , p_1 , c_2 et p_2 revient à changer la trajectoire des particules selon leur diamètre et donc la densité de particules au final.

De même, la variance présente de très fortes variations selon les cas. Pourtant, ces variations ne parasitent ni n'influencent les autres grandeurs. Il n'y a pas

de variations corrélées apparentes entre la variance et une autre grandeur. On peut alors se demander quelle est l'influence réelle de ce paramètre. Il semblerait que la variance soit plutôt une sorte de 'feu vert' indiquant si, oui ou non, il peut y avoir des flux décorrélés et donc variation de diamètre. La variance conditionne peu les autres grandeurs transportées et représente donc plutôt une quantification du 'potentiel local de séparabilité' de l'écoulement.

Quant aux valeurs des coefficients, la première approximation (4.55) préconisait $c_1 = 0.39$, $p_1 = 3.27$, $c_2 = 0.8$ et $p_2 = -1.58$. On voit que prendre des coefficients aussi simples que $c_1 = 0.5$, $p_1 = 3$, $c_2 = 0.5$ et $p_2 = -1$, non seulement ne transforme pas de façon radicale les résultats, mais a même tendance à améliorer les concordances.

Cet aspect est encourageant dans la mesure où il indique clairement que la physique du phénomène ne se situe pas dans le choix pointu de coefficients mais plutôt dans le fait d'avoir une vitesse conditionnée par le diamètre \vec{u}_τ qui permet une variation continue en 'S' entre les deux valeurs asymptotiques que sont la vitesse du gaz et la vitesse des particules de très fort St .

- Paramètre physique : τ_{conv}

Pour les coefficients numériques du CAS E, différentes valeurs du paramètre τ_{conv} ont ensuite été testées. Les résultats sont présentés à la Fig. 6.6.

A nouveau l'allure générale semble peu modifiée exceptée sur la variance et la répartition des particules. Les raisons et les conséquences sont exactement les mêmes que pour l'étude paramétrique de c_1 , p_1 , c_2 et p_2 . Changer la courbe $\vec{u}_\tau(d_2)$ revient à changer les trajectoires des particules donc le profil de densité, et les fortes variations de variance n'influencent pas les autres grandeurs mais autorisent juste l'existence de flux décorrélés qui peuvent engendrer une variation de diamètre.

Par contre, si on observe les zones correspondant à un fort α_2 , on remarque cette fois-ci que τ_{conv} gère totalement la validité du diamètre.

Pour des valeurs de τ_{conv} trop faibles, le diamètre est trop faible et à l'inverse la densité de particules trop forte. Une valeur faible de τ_{conv} correspond à un écoulement peu séparé (flux décorrélés faibles) et donc des variations de diamètre lentes.

A l'inverse, pour des valeurs de τ_{conv} trop fortes, le diamètre est trop important et la densité de particules trop faible. Une valeur forte de τ_{conv} correspond à un écoulement rapidement séparé (flux décorrélés forts) avec apparition précoce des diamètres extrêmes.

En ce sens, le paramètre physique τ_{conv} régit bien comme on le souhaite le régime de séparation de l'écoulement polydisperse.

L'effet des variations de τ_{conv} sur la courbe de $\vec{u}_\tau(d_2)$ est présenté à la Fig. 6.7.

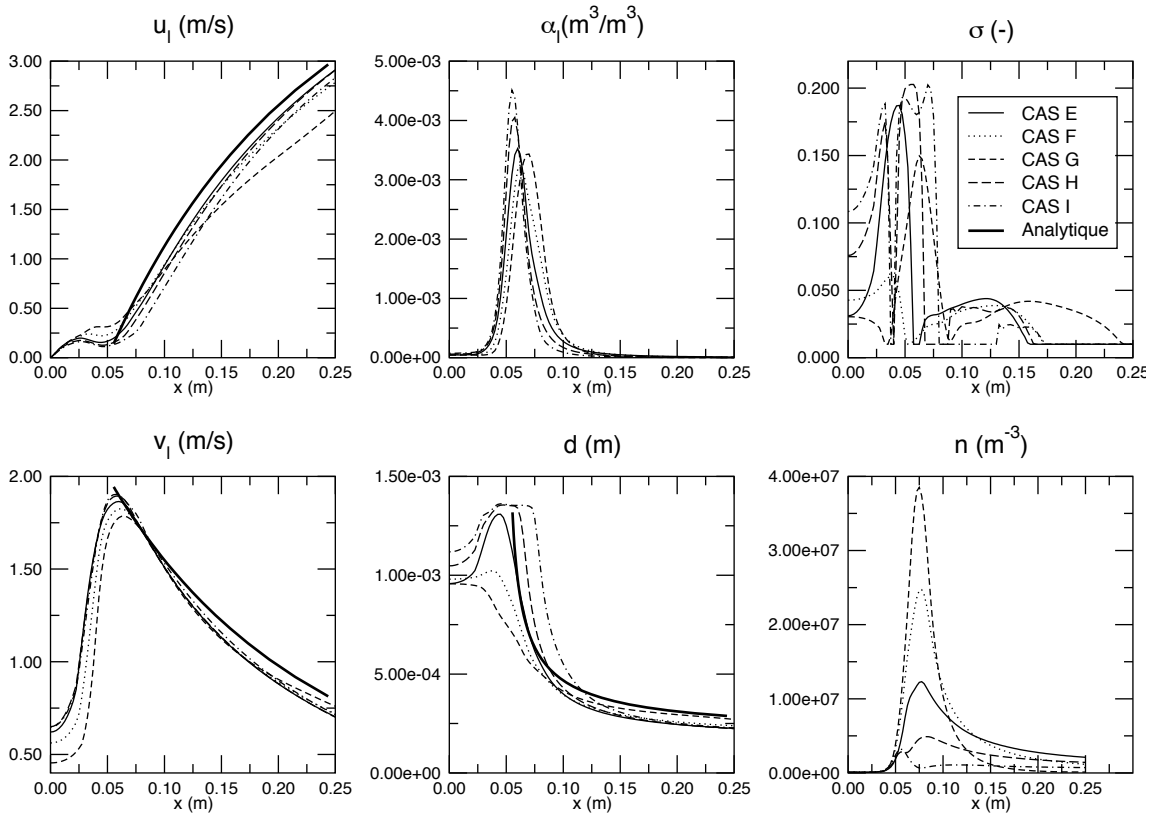


FIG. 6.6 – Etude paramétrique de τ_{conv} ($y = 0.15m$)

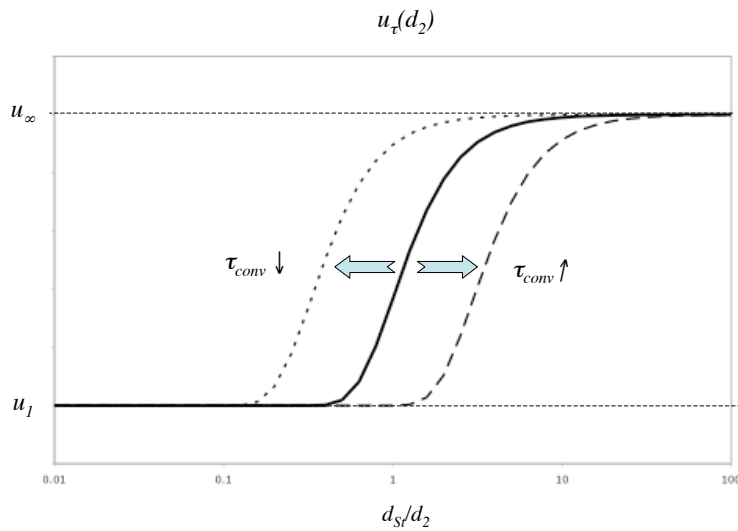


FIG. 6.7 – Influence de τ_{conv} sur \vec{u}_τ .

Plus τ_{conv} est faible, plus on force le modèle à 'présumer' que, pour la plupart des diamètres, les particules ont une vitesse proche de leur vitesse d'injection (représenté par des tirets courts). A l'inverse, plus ce paramètre est fort, plus on force le modèle à 'présumer' que, pour la plupart des diamètres, les particules ont une vitesse proche de la vitesse du gaz (représenté par des tirets longs). Pour une valeur optimale, les particules se répartissent de l'un à l'autre des comportements extrêmes selon ce que l'on observerait dans le cas réel et le modèle devient prédictif.

On remarque également que le paramètre τ_{conv} a peu d'influence sur les vitesses moyennes et la fraction volumique. Il conditionne peu la validité de résultats obtenus sur ces quantités et, par conséquent, ne permet pas de 'recoller' artificiellement si les phénomènes étaient mal modélisés. C'est un résultat important qui permet de s'intéresser à différentes valeurs de τ_{conv} sans craindre de voir l'écoulement complètement bouleversé de façon artificielle.

Pour schématiser, on pourrait même énoncer que ce paramètre ne gère que la répartition de diamètre sans quasiment influencer le champ de vitesse et de fraction volumique.

Estimation de τ_{conv} *a priori*

Le temps τ_{conv} est estimé en se basant sur des considérations physiques. La première idée est de considérer que ce paramètre représente le temps caractéristique pendant lequel une particule est soumise à une traînée orthogonale à sa trajectoire initiale. Dans le cas du spray liquide en soufflage transverse, comme les particules injectées sont relativement lourdes, c'est la hauteur du domaine ($0.15m$) divisée par la vitesse d'injection des particules ($2m/s$) soit $\sim 0.08s$ qui est retenue. On se rend compte qu'en fait cette approche n'est pas suffisante pour un écoulement turbulent où il est difficile de dégager de telles tendances. En élargissant l'analyse à tous les cas étudiés dans ce travail, il devient possible de dégager une approche synthétique plus complète. Ce point est discuté à la section 9.1.4, une fois la présentation de tous les cas réalisée.

Chapitre 7

Comparaison calcul/expérience : configuration Sommerfeld-Qiu

La configuration Sommerfeld-Qiu [70] a déjà été utilisée pour la validation de modèles polydisperses [2]. Elle permet de valider un code LES sur la phase gazeuse, car l'écoulement rotatif met en jeu des phénomènes complexes de couches de mélange et d'interactions turbulentes, et sur la phase dispersée étant donnés les couplages avec le fluide porteur turbulent à capturer pour chaque diamètre.

De plus, le grand nombre de résultats donnés sur cette configuration (profils de vitesse moyenne et fluctuante, de diamètre, de vitesse conditionnée par le diamètre...) permet facilement de comparer directement les variables caractéristiques des modèles Lagrangien comme Eulerien.

Enfin, la faible fraction volumique de particules et l'absence de fortes interactions avec les parois dans la grande majorité de la zone de mesure permet de pouvoir valider uniquement le modèle de transport.

La géométrie expérimentale est présentée à la Fig. 7.1.

La zone 1 correspond à l'écoulement primaire droit chargé en billes de verre. Dans la zone 2, un écoulement secondaire, annulaire, rotatif et sans particules, est entretenu. Au niveau de l'élargissement brusque, les deux écoulements interagissent créant de nombreuses structures turbulentes qui arrachent des particules du jet primaire. La mise en rotation de ce même jet centrifuge les particules, plus ou moins tard selon leur taille, les entraînant en direction des parois. Le tube principal, long de 1.5m, est réalisé en Plexiglas afin de permettre les mesures par anémomètre à effet Doppler (Phase-Doppler Anemometer - PDA selon la terminologie anglophone) sur les trois composantes de vitesse et la taille des particules. Enfin, en bout de configuration, une boîte rectangulaire percée de quatre ouvertures elles aussi rec-

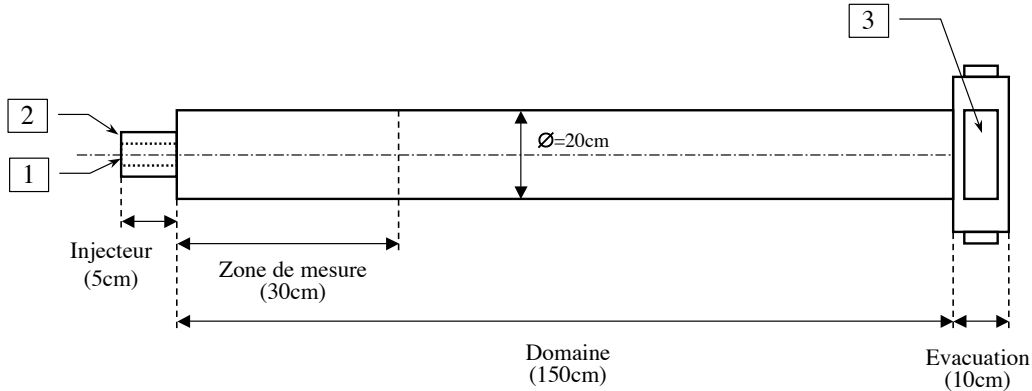


FIG. 7.1 – Configuration expérimentale

tangulaires permet l'évacuation. Selon Sommerfeld [70], cette boîte a une influence significative sur la structure de l'écoulement dans la zone de mesure au travers de la remontée d'ondes inertielles dues aux rétrécissement imposé par les quatre ouvertures.

Ce cas a déjà fait l'objet d'une étude par Apte *et al.* [2] en simulation des grandes échelles avec une approche Lagrangienne du transport des particules. Les résultats qu'ils obtiennent présentent un très bon accord avec l'expérience et le but de ce travail est d'atteindre des résultats comparables avec le gain en coût et en robustesse que peut apporter la description Eulérienne.

7.1 Configuration

Le maillage réalisé pour cette configuration comporte 750000 noeuds et 4,5 millions de cellules tétraédriques. La plus petite cellule a un volume de $2.10^{-11}m^3$ (soit, pour donner une ordre de grandeur, 30 fois plus que la plus petite cellule du maillage utilisé par Apte et Mahesh [2]).

Une visualisation des tailles de mailles par rapport à la taille de configuration et du maillage de l'injecteur sont présentées en Figs. 7.2 et 7.3.

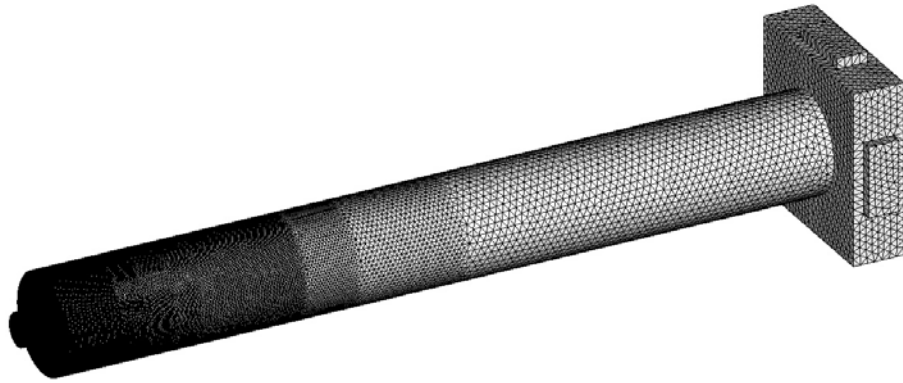


FIG. 7.2 – Maillage de peau du domaine calculé

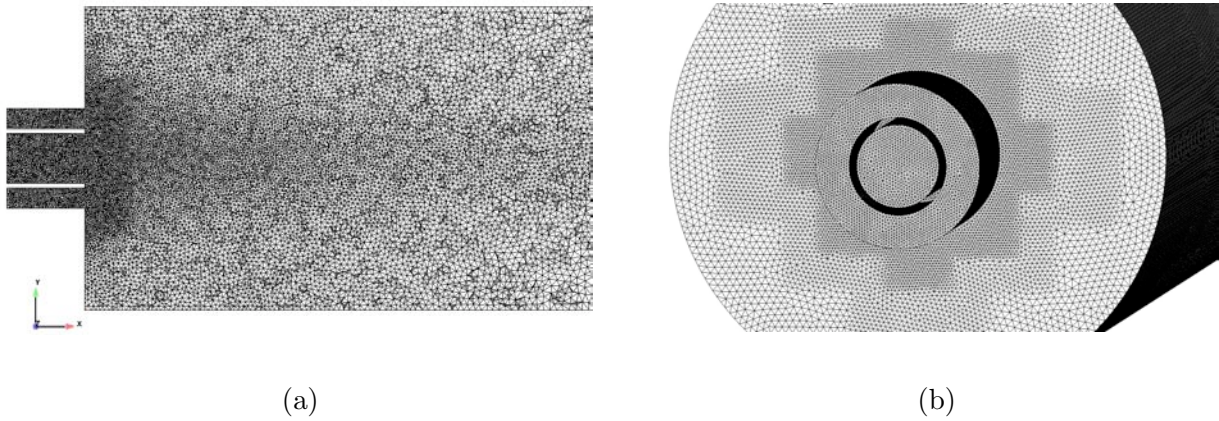


FIG. 7.3 – Maillage de l'injecteur
(a) Coupe (b) Agrandissement

Les conditions limites utilisées sont répertoriées dans le tableau 7.1.

Conditions limites :	Gaz	Liquide
Entrée intérieure (A) :	relax sur $u_{1,n}, u_{1,t}$ et T_1 avec injection de turbulence	relax sur $u_{2,n}, u_{2,t}, d_{00}, \hat{\sigma}$ et n_2
Valeurs imposées :	valeurs interpolées ¹	valeurs interpolées ¹
Entrée extérieure (B) :	relax sur $u_{1,n}, u_{1,t}$ et T_1 avec injection de turbulence	mur glissant
Valeurs imposées :	valeurs interpolées ¹	
Sortie (C) :	relax sur p_1	convection pure
Valeurs imposées :	$p_1 = 101350 Pa$	
Autre (D) :	mur glissant adiabatique	mur glissant

TAB. 7.1 – Résumé des conditions limites

¹ : selon le profil expérimental en $x=3mm$.

Les paramètres physiques retenus pour ce cas sont :

- $\rho_2 = 2500 kg/m^3$
- $\nu_1 = 1.788 \cdot 10^{-5}$
- $\tau_{drag}(d_{00}) \sim 0.015s$

Ce qui conduit aux valeurs suivantes des grandeurs adimensionnelles :

- $St(d_{00}) \sim 1$ pour le cas A, $St(d_{00}) \sim 3$ pour le cas B
- $d_{St} \sim 1$ pour le cas A, $d_{St} \sim 1$ pour le cas B
- $Re_p(d_{00}) \sim 12$

7.2 Résultats

Deux cas de simulation sont présentés. Le cas A correspond à une simulation pour laquelle le seul paramètre du modèle τ_{conv} a été choisi de façon heuristique selon les critères du paragraphe 9.1.4, mais avant d’avoir pu dégager la formule (9.4). Le cas B est un exemple intéressant de résultats obtenus avec un paramètre τ_{conv} trop faible.

7.2.1 Cas A

Ce cas correspond à la valeur $\tau_{conv} = 0.015s$.

Grandeurs moyennes

Les résultats obtenus pour les grandeurs moyennes gazeuses sont présentés sur les Fig. 7.4 à Fig. 7.6.

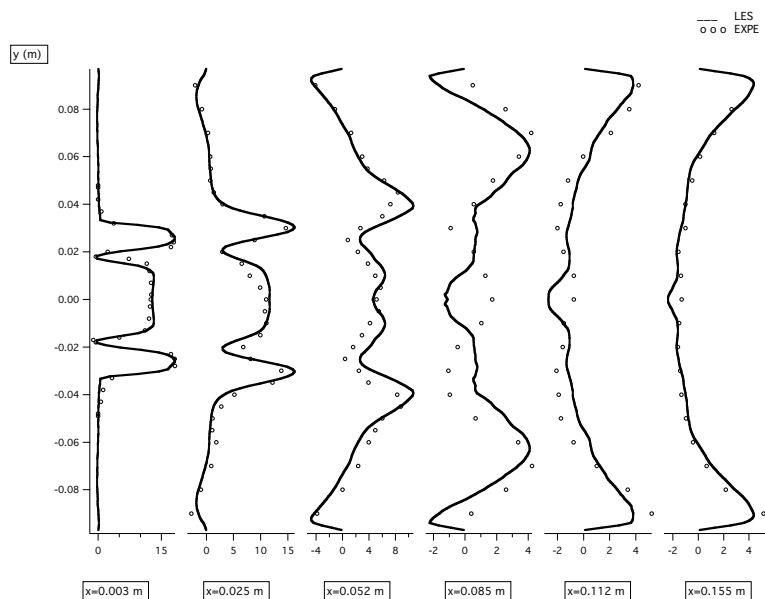


FIG. 7.4 – Vitesse axiale moyenne du gaz. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

On constate que les niveaux et les tendances de la vitesse axiale sont très bien respectés avec toutefois un déficit en $x = 0.085m$ au niveau de l'axe $y = 0$ et une légère sur-prédiction des vitesses en $x = 0.052$ au niveau des 'creux' $y = \pm 0.025m$. De même, les vitesses tangentielle et radiales présentent de bons niveaux et de bonnes tendances. Les vitesses tangentielles sont prises toujours positives comme dans les données expérimentales de référence, ce qui explique la présence de 'pointes' au niveau de l'axe de symétrie de la configuration. Il est intéressant de regarder les deux vitesses (radiale et tangentielle) ensemble car on constate un déficit de vitesse radiale en $(x = 52mm, y = \pm 0.045m)$ correspondant à une surévaluation de la vitesse tangentielle en ces mêmes zones. Ce phénomène semble lié à une légère sous-ouverture du jet à cet endroit.

Les vitesses nulles observées sur les bords ne font que refléter les conditions d'adhérence à la paroi de la condition limite utilisée.

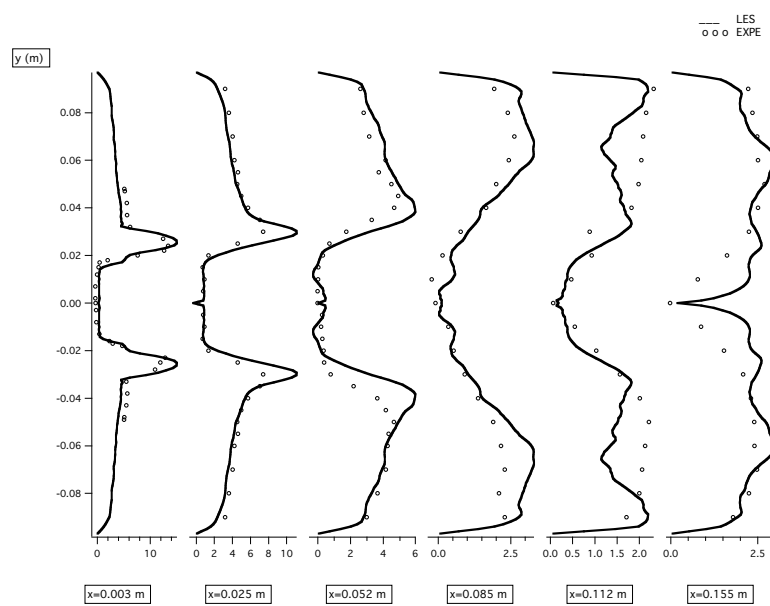


FIG. 7.5 – Vitesse tangentielle moyenne du gaz. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

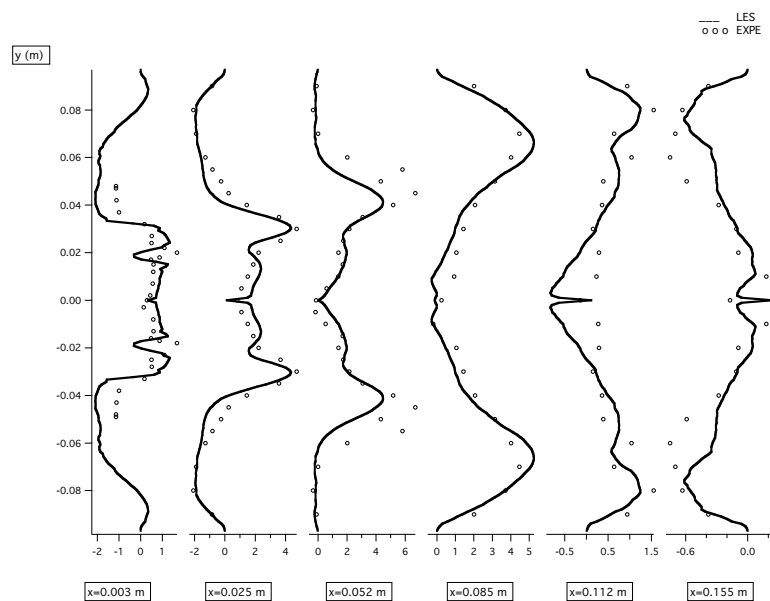


FIG. 7.6 – Vitesse radiale moyenne du gaz. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

Les résultats obtenus pour les grandeurs moyennes de la phase liquide sont présentés sur les Fig. 7.7 à Fig. 7.10.

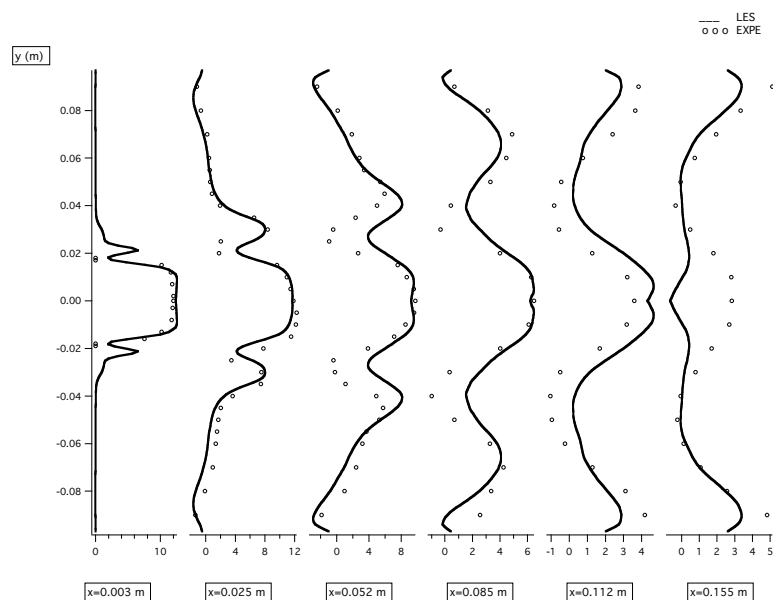


FIG. 7.7 – Vitesse axiale liquide. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

On peut mettre en évidence le caractère polydisperse du spray en étudiant la corrélation du champ de vitesse liquide avec le champ de vitesse gazeuse. Dans les zones où cette corrélation est forte, on peut affirmer qu'il y a des particules de petits diamètres. Cela est particulièrement visible pour les trois composantes de vitesse sur les coupes $x = 0.003m$ et $x = 0.025m$ dans les zones $y > 0.4m$ et $y < -0.4m$. A l'inverse, sur l'axe, malgré la zone de recirculation gazeuse, les vitesses restent proches de leur valeur initiale, c'est la preuve de la présence de particules de diamètre plus important. La non uniformité de l'intensité des corrélations entre les champs de vitesse gazeuses et liquides dans des directions orthogonales à l'écoulement moyen atteste du caractère polydisperse des particules injectées. En effet, pour un écoulement monodisperse, les particules relaxeraient progressivement et uniformément vers la vitesse gazeuse depuis leur point d'injection. La turbulence engendrerait des inhomogénéités mais, sur l'écoulement moyenné en temps, ces différences disparaîtraient. Cette différence est essentielle entre les deux types d'écoulement diphasique. Par rapport à l'expérience, à nouveau, on constate un bon accord des allures des profils et des niveaux. On peut cependant ajouter deux nuances : les 'creux' visibles à la zone frontière du jet central avec le 'swirl' externe sont sous-évalués (vitesses

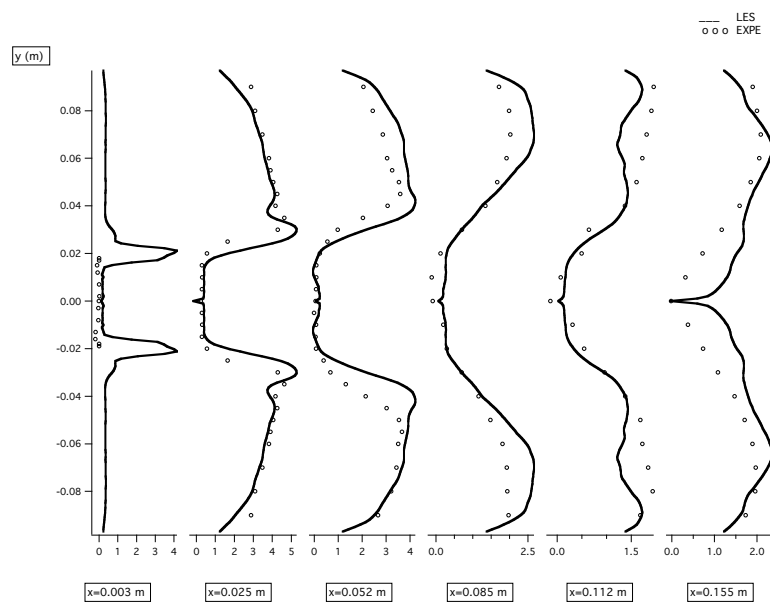


FIG. 7.8 – Vitesse tangentielle liquide. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

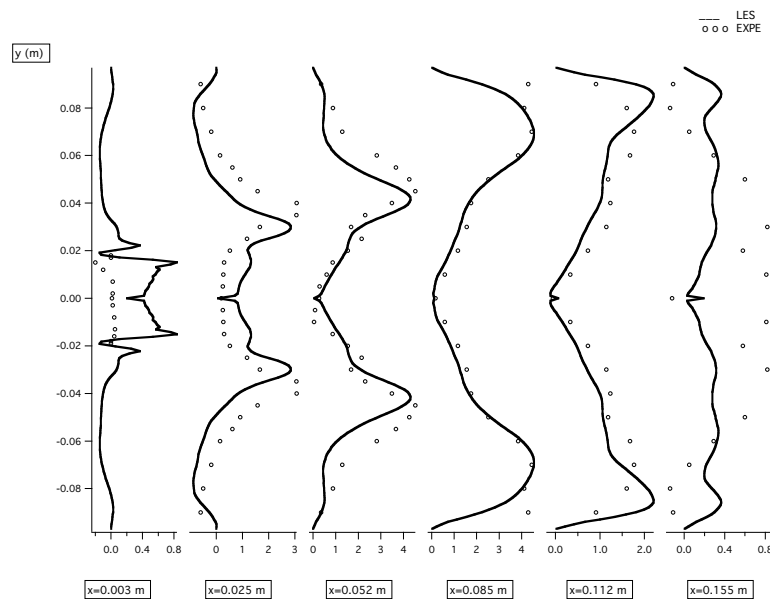


FIG. 7.9 – Vitesse radiale liquide. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

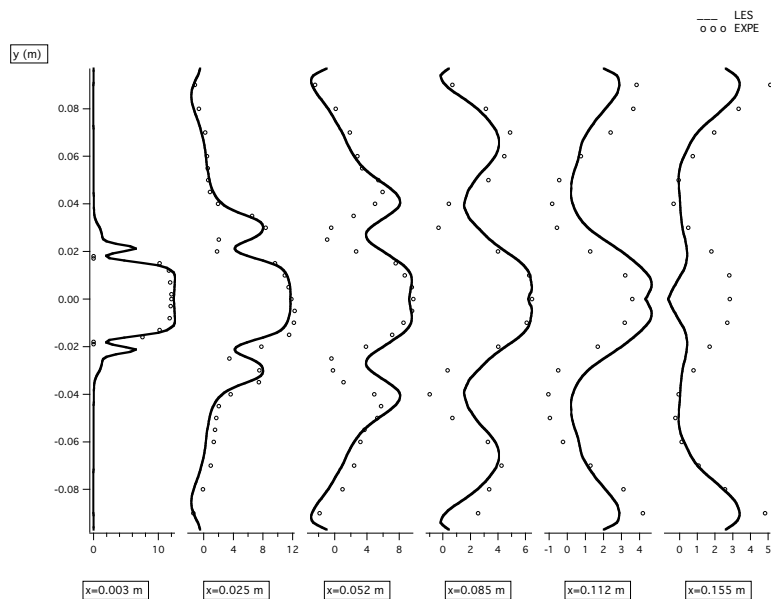


FIG. 7.10 – QDM axiale liquide ($\alpha_2 U_2$). AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (\circ)

trop importantes autour de $y = 0.02m$) et en $x = 0.155m$, le profil calculé semble déconnecté des valeurs données par l'expérience sur l'axe. La première inexactitude est due au fait qu'il n'y a quasiment pas de particules dans la zone extérieure au jet central et que par conséquent les résultats doivent être analysés avec précaution dans ces zones. La seconde est due à une ouverture trop précoce du jet de particules. Cela se voit particulièrement bien sur les profils de QDM axiale liquide ($\alpha_2 U_2$ à la Fig. 7.10). La cause la plus probable semble être le déficit de vitesse axiale gazeuse que l'on observe très nettement à la Fig. 7.4 en $x = 0.085m$, $0.112m$ et $0.155m$. Ce déficit engendre une surestimation de la traînée contra-motrice pour les particules, les ralentissant de façon trop importante. La traînée due aux vitesses radiale et tangentielle continue par contre d'entraîner les particules vers l'extérieur produisant cette ouverture prématurée.

Cette explication est confirmée par les profils de la Fig. 7.8 où l'on observe en $x = 0.085m$ une surestimation nette des vitesses tangentielles sur la zone $|y| > 0.05m$ qui engendre à son tour une surestimation des vitesses radiales en $x = 0.112m$ pour $|y| > 0.07m$.

Densité, fraction volumique et conséquences sur l'interprétation des résultats

Les profils moyen de densité et de fraction volumique (équivalente à la fraction massique au facteur ρ_2 près) sont présentés respectivement aux Figs. 7.11 et 7.12.

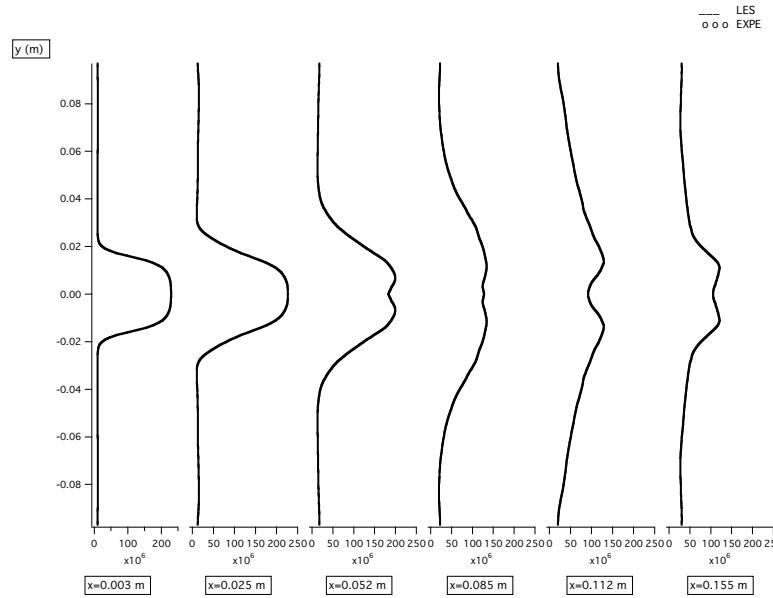


FIG. 7.11 – Densité moyenne des particules. AVBP_TPF(-)

On constate que le jet moyen de particule est très compact et s'élargit doucement en s'atténuant. Il y a cependant un effet de moyenne trompeur. Les bords du jet sont agités de structures turbulentes gazeuses qui arrachent à intervalles irréguliers une partie des particules. Cela apparaît sous la forme de zones situées de part et d'autre de l'axe $y = 0$ dans lesquelles on a l'impression que la densité et la fraction volumique ont diffusé. La Fig. 7.13 permet de visualiser ces zones. Le profil moyen de vitesse axiale liquide y est représenté et les zones turbulentes dans lesquelles les moyennes incluent les particules numériques sont indiquées en gris clair.

Dans ces zones, il y a une alternance 'présence de particules'/'absence de particules' qui crée des valeurs intermédiaires entre une densité nulle et la densité d'injection. Or, moyenniser des 'particules de vide' avec des particules injectées conduit à des valeurs non représentatives au sens de l'expérience. C'est donc dans ces zones que l'on observe le moins bon accord avec les résultats expérimentaux sur les profils

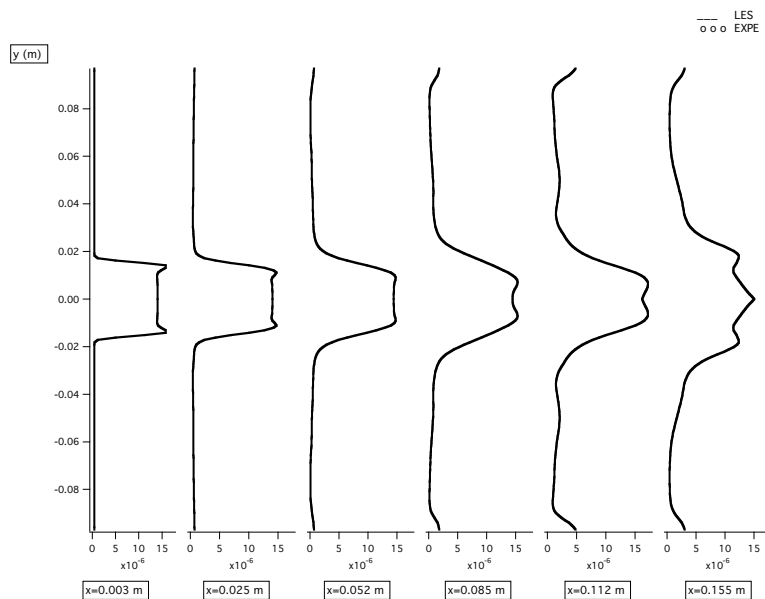


FIG. 7.12 – Fraction massique moyenne des particules. AVBP_TPF(-)

de vitesse ou de diamètre, et ce d'autant plus que les moyennes contiennent peu de particules 'physiques'. Pour n'évaluer que le transport physique, il faudrait pouvoir effectuer les moyennes seulement lorsque le diamètre est supérieur à une valeur seuil par exemple, de façon à éliminer le poids des particules numérique de vide. Ceci amène à la conclusion qu'en Eulerien comme en Lagrangien, moins une zone est dense en particules, moins les résultats sont significatifs.

Par contre, ces zones 'vides' passent sans problème numériquement. De plus, elles ne polluent pas le reste de l'écoulement. Ce sont deux points sont essentiels pour pouvoir simuler des écoulements réactifs dans lesquelles la combustion produit naturellement des zones sans carburants qui ne doivent pas générer d'instabilités ni modifier le reste du calcul.

Grandeurs fluctuantes

Les résultats obtenus pour les grandeurs fluctuantes moyennes gazeuses sont présentés sur les Fig. 7.14 à Fig. 7.16.

Les niveaux de turbulence gazeuse sont en très bon accord avec l'expérience avec une légère faiblesse sur la partie avale de la configuration ($x \geq 0.085m$). Ce problème peut être dû à un temps de moyenne encore trop faible. On remarque également un

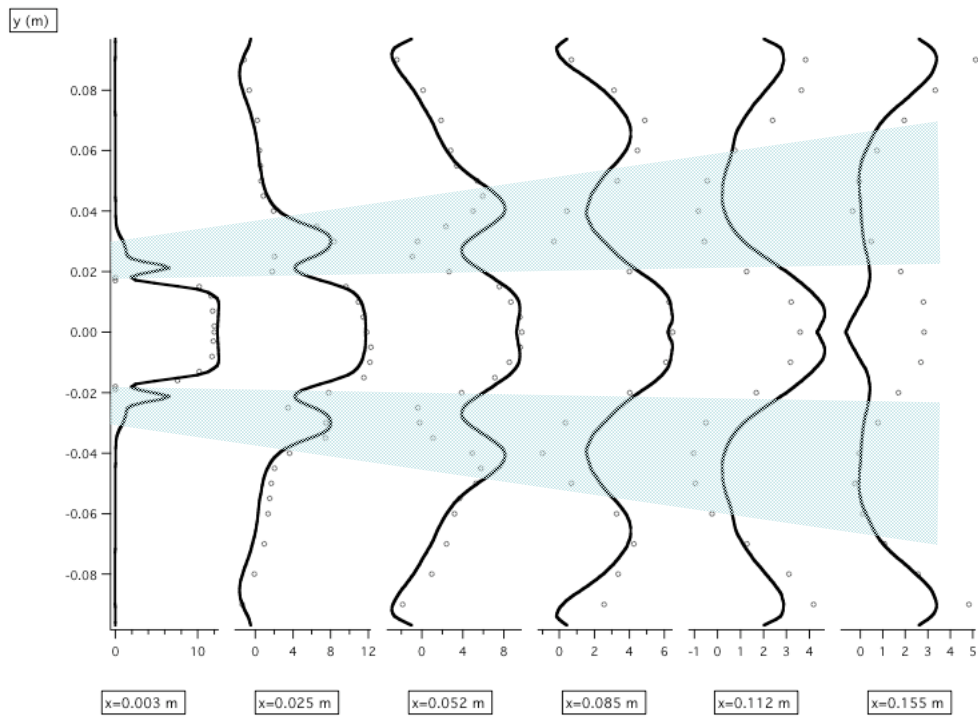


FIG. 7.13 – Vitesse axiale liquide moyenne et zones de mélange. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

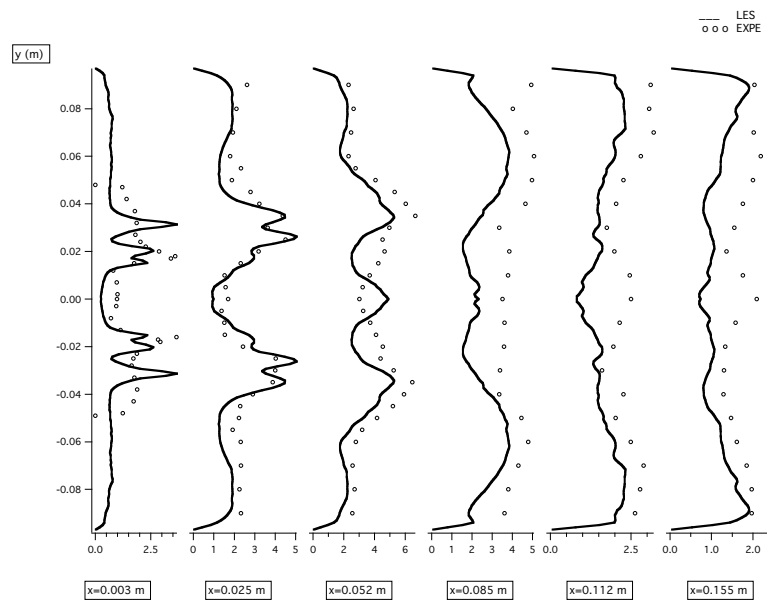


FIG. 7.14 – Vitesse axiale fluctuante moyenne du gaz. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (\circ)

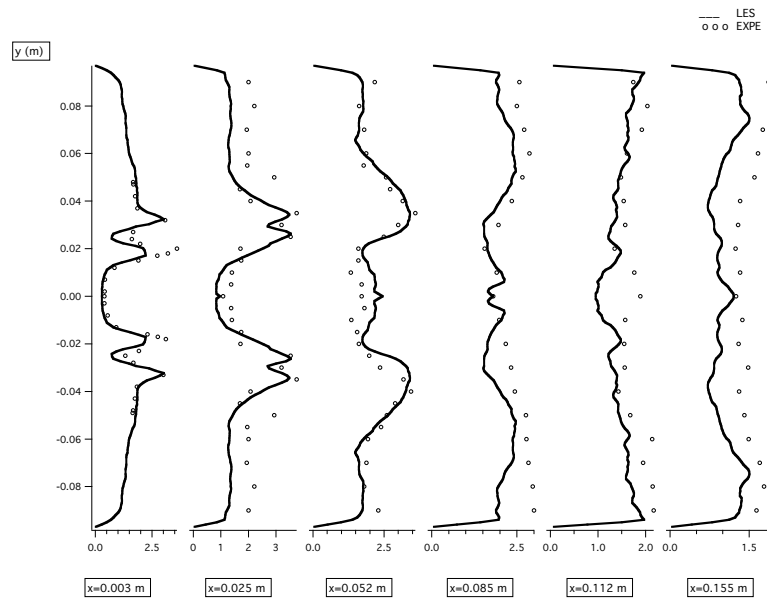


FIG. 7.15 – Vitesse tangentielle fluctuante moyenne du gaz. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (\circ)

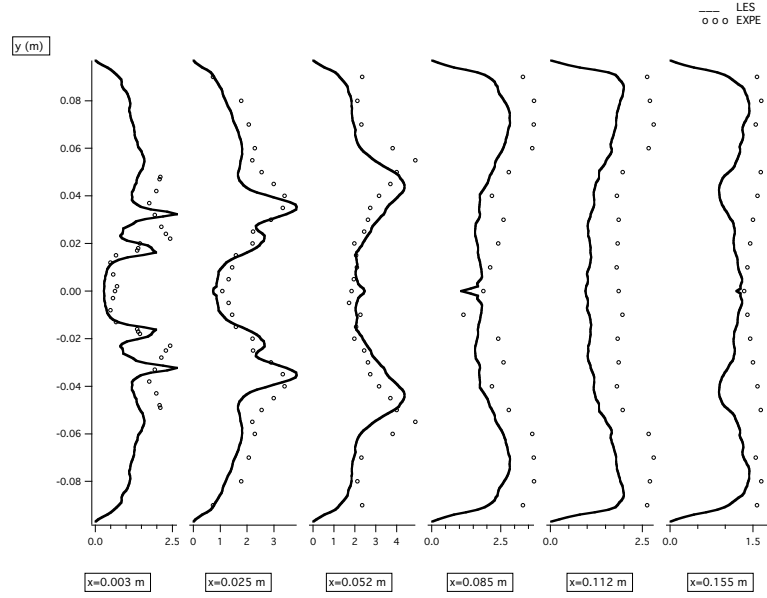


FIG. 7.16 – Vitesse radiale fluctuante moyenne du gaz. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (○)

comportement étonnant en $x = 0.052m$, la présence d'un triple pic là où l'expérience donne seulement deux pics. C'est d'autant plus étonnant que cette singularité ne se retrouve pas dans les autres directions. C'est peut-être un point à étudier pour comprendre le déficit de vitesse axiale qui apparaît en $x = 0.085m$.

Si les fluctuations de vitesse gazeuse sont bien définies [34 ; 8], les fluctuations de vitesse de la phase dispersée sont des quantités qui nécessitent une attention particulière avant d'être comparées aux résultats expérimentaux.

En effet, il convient de s'intéresser à la définition donnée par Sommerfeld *et al.* [70], des quantités fluctuantes liquides mesurées. D'après les notations de ce document, les quantités mesurées sont $\overline{\{u_2\}_2}$ et $\sqrt{\overline{\{u_2\}'_2}}$ avec :

$$\overline{\{u_2\}_2} = \overline{\{u_2\}_2} + \overline{\{u_2\}'_2} \quad (7.1)$$

où le surlignement représente la moyenne temporelle et l'apostrophe indique une quantité fluctuante dans le temps.

On va chercher à exprimer ces grandeurs en fonction des grandeurs transportées par le code de calcul. La moyenne du carré de la vitesse fluctuante se développe en :

$$\overline{\{u_2\}'_2} = \overline{\{u_2\}_2^2} - \overline{\{u_2\}_2}^2 \quad (7.2)$$

Or la décomposition de la vitesse liquide donne :

$$\begin{aligned}\{u_2\}_2 &= \{U_2 + u_2''\}_2 \\ &= U_2 + \{u_2''\}_2\end{aligned}\quad (7.3)$$

En reportant ce résultat dans (7.2), il vient :

$$\begin{aligned}\overline{\{u_2\}_2'^2} &= \overline{U_2^2} + \overline{\{u_2''\}_2^2} + 2\overline{U_2\{u_2''\}_2} - \overline{U_2^2} - \overline{\{u_2''\}_2^2} - 2\overline{U_2\{u_2''\}_2} \\ &= \overline{U_2^2} - \overline{U_2^2} + \overline{\{u_2''\}_2^2} - \overline{\{u_2''\}_2^2}\end{aligned}\quad (7.4)$$

En faisant apparaître les valeurs fluctuantes de U_2 et $\{u_2''\}_2$, il vient finalement :

$$\overline{\{u_2\}_2'^2} = \overline{U_2'^2} + \overline{\{u_2''\}_2'^2}\quad (7.5)$$

Cette relation démontre qu'en écoulement polydisperse, la fluctuation de vitesse donnée par l'expérience correspond aux fluctuations temporelles de vitesse moyenne et de vitesse décorrélée moyenne. Les résultats obtenus avec cette définition de la vitesse liquide fluctuante sont présentés à la Fig. 7.17.

La comparaison avec l'expérience montre que les niveaux et les allures obtenus par

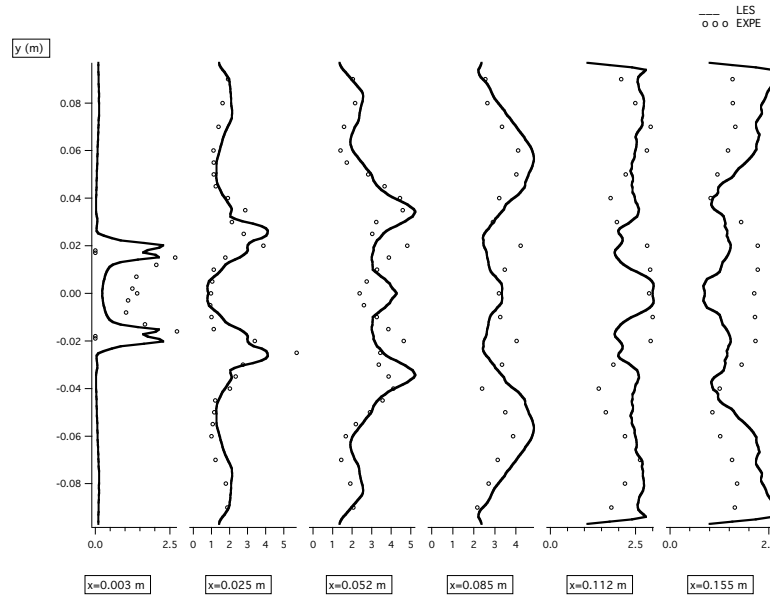


FIG. 7.17 – Vitesse axiale fluctuante moyenne du liquide. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

simulation sont tout à fait pertinents. Le déficit observé à proximité de l'entrée ne semble pas avoir de conséquence sur le développement aval, même si l'on peut noter

un autre déficit en $x = 0.155m$ au niveau de l'axe.

La présence des trois pics en $x = 0.052m$ dénote une forte corrélation entre les fluctuations liquides et celles de la phase gazeuse. Or comme montré au chapitre 6, le modèle a beaucoup d'influence sur la dispersion des particules (en terme de densité ou de fraction massique) mais très peu d'influence sur le champ de vitesse liquide. Ainsi, une meilleure prédiction des valeurs fluctuantes liquide passe par une meilleure prédiction des valeurs fluctuantes gazeuses.

Diamètre

Les profils de diamètre sont présentés à la Fig. 7.18 où sont également représentés les résultats de Apte et Mahesh [2].

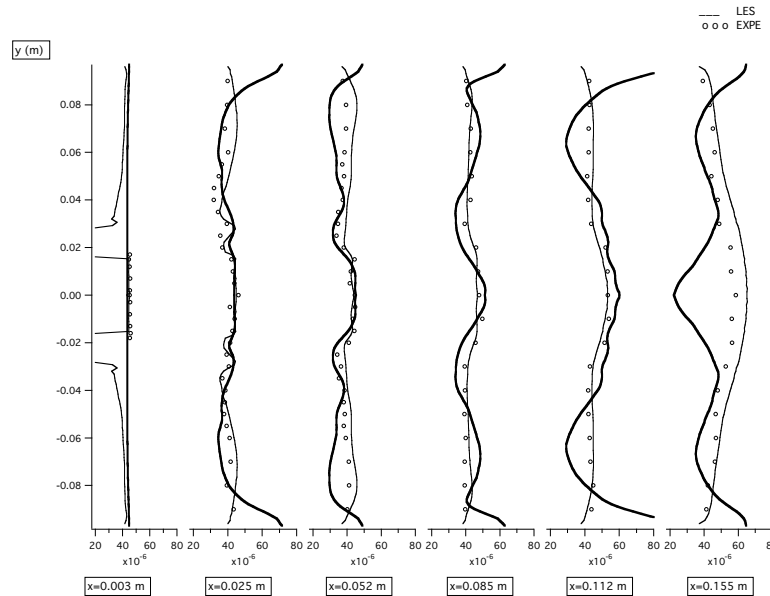


FIG. 7.18 – Diamètre caractéristique moyen des particules (d_{00}). AVBP-TPF(-), Apte et Mahesh [2] (-), Sommerfeld[70] (o)

Les diamètres sont assez correctement prédits malgré les inexactitudes du champ de vitesse. Cette constatation déjà faite sur le cas du jet liquide en écoulement transverse (Chap. 6, Fig. 6.3) où l'on observe en $x=0.1m$ une très bonne prédiction des diamètres alors qu'en cette abscisse, les vitesses présentent un déficit. Ce résultat

est peut-être en partie dû au fait que le diamètre est une racine cubique de la fraction volumique, ce qui a naturellement tendance à diminuer l'effet des erreurs sur les grandeurs transportées.

On note des diamètres trop importants au niveau des parois. L'absence de traitement particulier (notamment pour la prise en compte globale des rebonds) induit une stagnation, puis un entraînement par la traînée des particules légères et donc au final une surestimation du diamètre dans les zones de proche paroi. Cet aspect est un des axes d'amélioration de ce travail.

La comparaison les profils obtenus par Apte et Mahesh [2] en simulation Lagrangienne montre que le modèle Eulérien, bien que moins précis, est capable de capter l'essentiel du phénomène.

Vitesses reconstituées

D'après la relation (4.47), il est possible, à partir des champs instantanés de vitesses du spray polydisperse de reconstituer le champ de vitesse monodisperse pour n'importe quel diamètre.

Ainsi, la vitesse \vec{u}_{30} des particules de diamètre $30\mu m$ s'écrit :

$$u_{30,i} = u_{1,i} + (u_{\infty,i} - u_{1,i}) \exp\left(-\frac{d_{St}^2}{(30 \cdot 10^{-6})^2}\right) \quad (7.6)$$

De même, on reconstitue la vitesse \vec{u}_{60} des particules de diamètre $60\mu m$:

$$u_{60,i} = u_{1,i} + (u_{\infty,i} - u_{1,i}) \exp\left(-\frac{d_{St}^2}{(60 \cdot 10^{-6})^2}\right) \quad (7.7)$$

Les opérations qui visent à retrouver des grandeurs à partir de leur moyenne sont en général délicates et peu précises. C'est donc avec prudence que cette opération a été effectuée à des fins d'analyse et pour comparaison avec les résultats expérimentaux qui fournissent généralement ce genre de grandeurs. Les résultats sont présentés aux Figs. 7.19, 7.21 et 7.23 pour \vec{u}_{30} et aux Figs. 7.20, 7.22 et 7.24 pour \vec{u}_{60} .

La comparaison avec les mesures montre que les niveaux sont bien reproduits, ce qui représente un point très intéressant dans le but d'obtenir des champs monodisperse *a priori*, par simple reconstruction à partir d'un calcul polydisperse. Les écarts observés semblent correspondre à des écarts déjà observés sur les champs polydisperses moyens pour l'une ou l'autre des deux phases. Comme la méthode de reconstruction utilise à la fois les vitesses gazeuse et liquide, ce résultat n'est pas

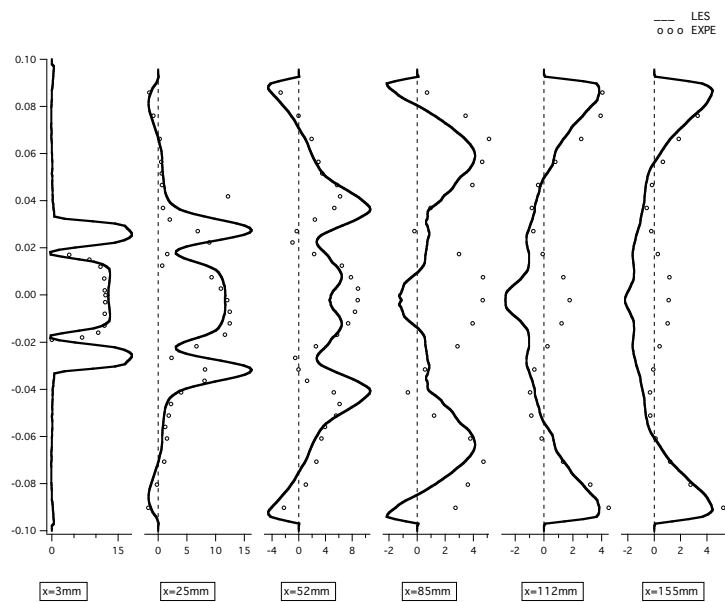


FIG. 7.19 – Vitesse axiale reconstruite des particules de diamètre $30\mu m$. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (○)

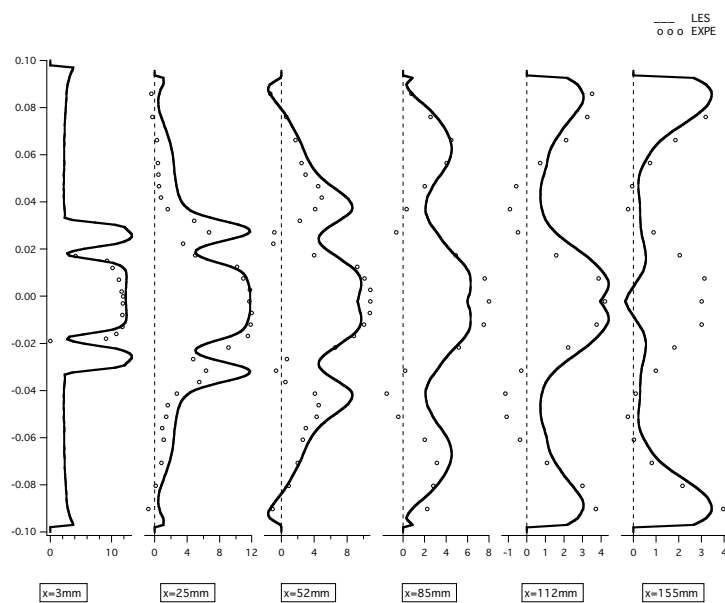


FIG. 7.20 – Vitesse axiale reconstruite des particules de diamètre $60\mu m$. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (○)

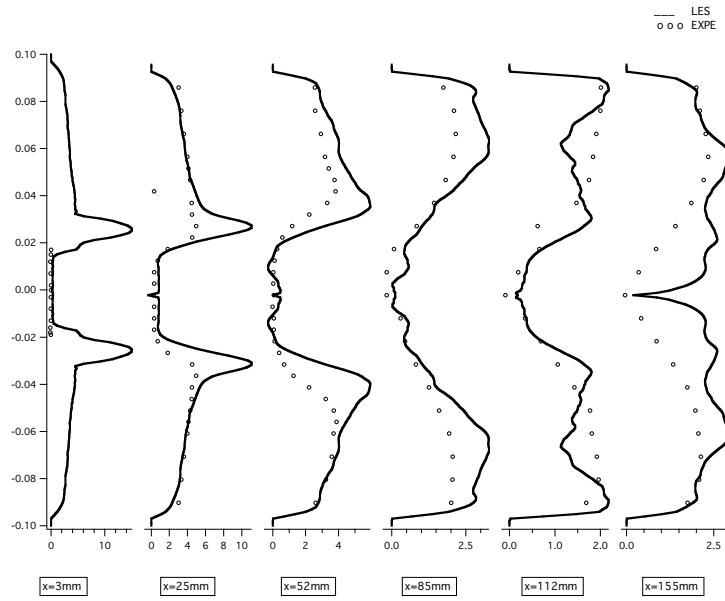


FIG. 7.21 – Vitesse tangentielle reconstruite des particules de diamètre $30\mu\text{m}$. AVBP-TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

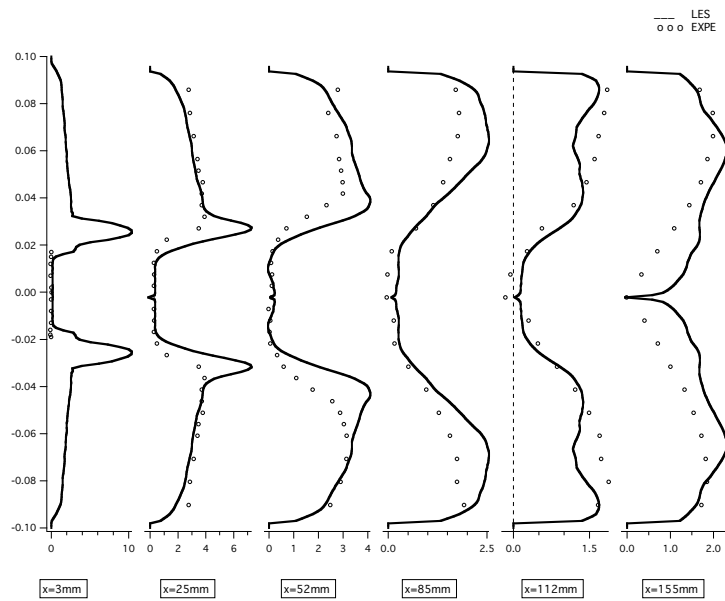


FIG. 7.22 – Vitesse tangentielle reconstruite des particules de diamètre $60\mu\text{m}$. AVBP-TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

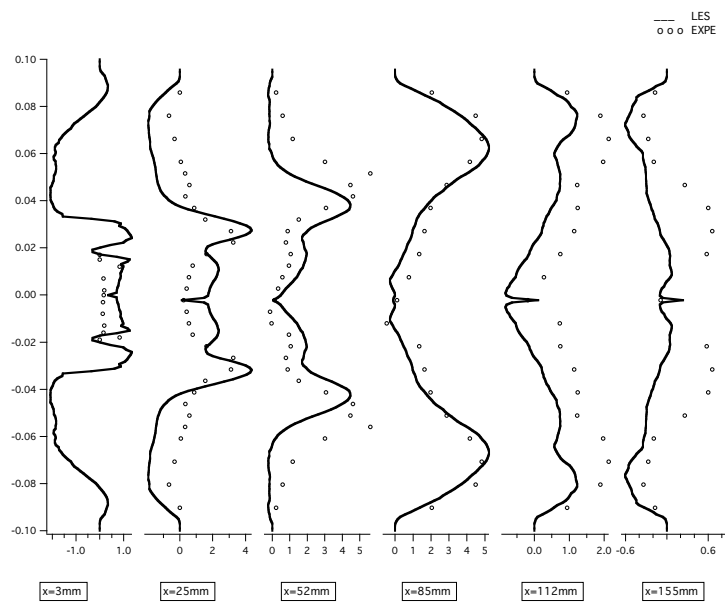


FIG. 7.23 – Vitesse radiale reconstruite des particules de diamètre $30\mu m$. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

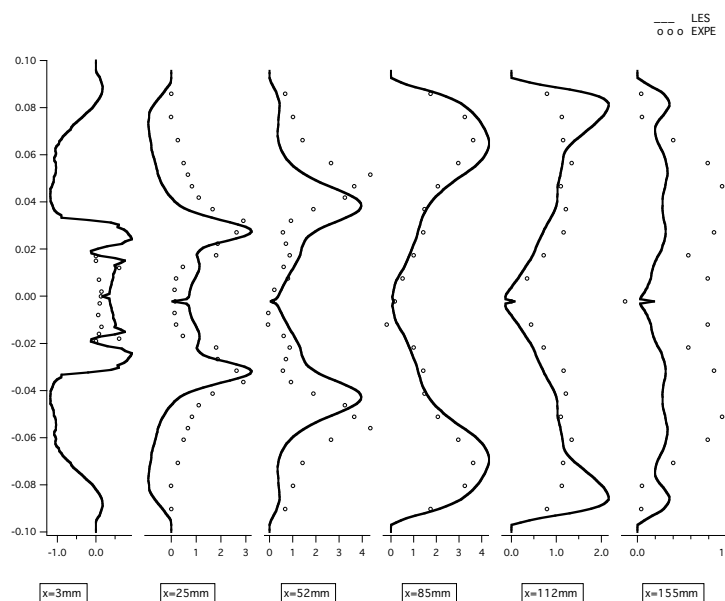


FIG. 7.24 – Vitesse radiale reconstruite des particules de diamètre $60\mu m$. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

étonnant. Dans la mesure où par contre la méthode de reconstruction n'amplifie pas les écarts, cela permet de supposer fortement que sa validité n'est pas mise en cause et qu'en présence de résultats 'parfaits', la reconstruction produirait des résultats 'parfaits' également.

Par ailleurs, on constate que les comportements essentiels des deux populations ont bien été captés (la plus ou moins grande sensibilité à la traînée), à savoir les particules de diamètre $30\mu m$ forment un jet qui s'ouvre très tôt tandis que les particules de diamètre $60\mu m$ ont une trajectoire presque rectiligne jusqu'en $x = 0.155m$.

Les profils reconstitués de vitesses radiales et tangentielles confirment ces tendances avec les mêmes ordres de précision.

Par ailleurs, il convient de noter qu'il existe certaines zones pour lesquelles on observe un écart plus important entre profil reconstitué et profil expérimental. Ces écarts sont maximaux dans les zones identifiées à la Fig. 7.13. Ainsi, l'écart semble en majeure partie dû à une densité trop faible pour être caractéristique. Cette corrélation se vérifie pour les deux vitesses \vec{u}_{30} et \vec{u}_{60} . A chaque fois que la densité baisse par rapport à la densité d'injection, l'écart semble augmenter.

En conclusion, si l'on exclut les zones trop peu denses pour être représentatives, on obtient de bons résultats sur la reconstruction. Ceci semble indiquer que le modèle polydisperse est en bonne adéquation avec la physique qu'il souhaite représenter et reproduit correctement la dynamique des particules. Les hypothèses monodisperses utilisées pour en tirer des propriétés de groupe semblent être les bonnes et l'utilisation de moyennes dans cette description ne constitue donc plus une perte forte des informations particulières.

7.2.2 Cas B

Ce cas est très intéressant pour dégager des éléments probants sur l'influence du seul paramètre du modèle τ_{conv} . Le cas est similaire en tous points au cas précédent, avec un paramètre τ_{conv} valant cette fois-ci 0.004s (contre 0.015s précédemment). Si l'on considère les grandeurs moyennes liquides (présentées aux Figs. 7.25-7.27), les résultats semblent tout à fait acceptables et en tout cas du même ordre de précision que pour le cas A.

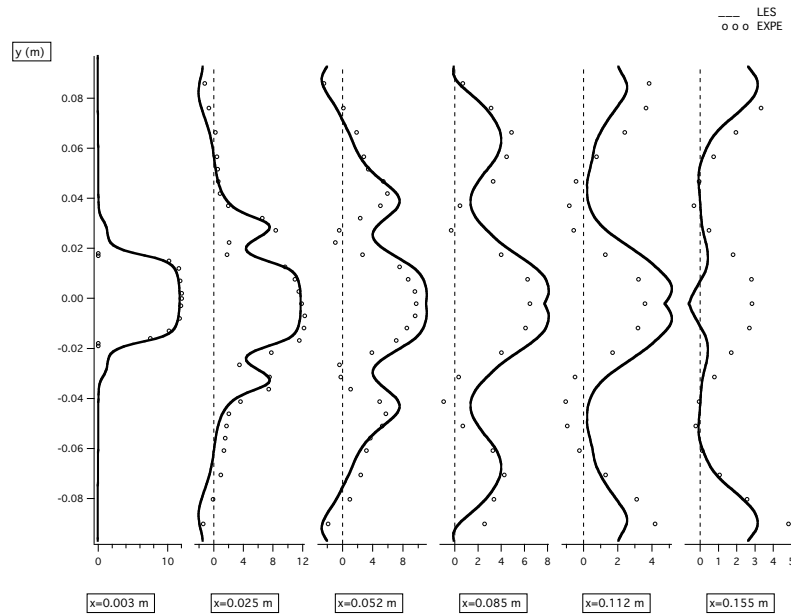


FIG. 7.25 – Vitesse axiale liquide. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

Par contre la QDM (Fig. 7.29) présentent des tendances très différentes. Le jet semble s'ouvrir plus tard ($x \sim 0.150m$ contre $x \sim 0.120m$ pour le cas A) mais beaucoup plus vite. De même, le diamètre (Fig. 7.28) suit beaucoup moins les résultats expérimentaux et tout particulièrement au fur et à mesure que l'on s'approche des parois.

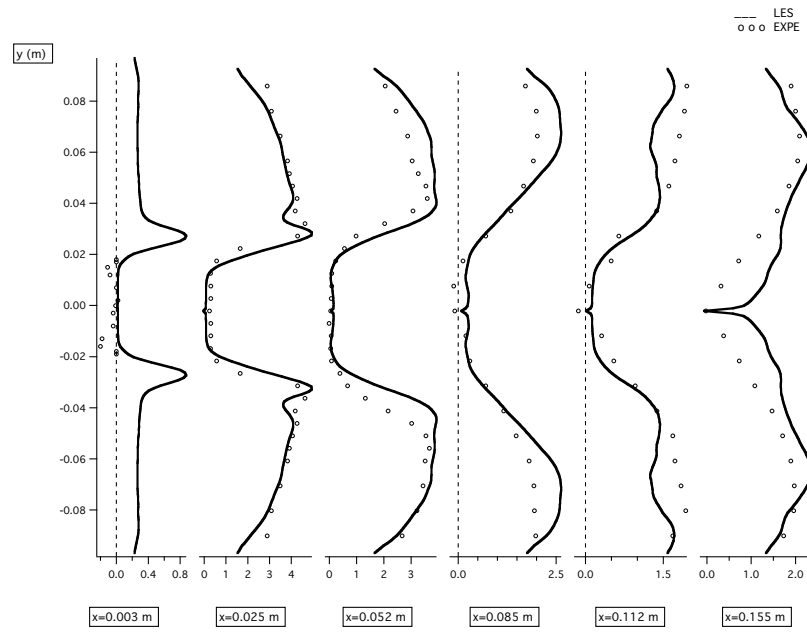


FIG. 7.26 – Vitesse tangentielle liquide. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

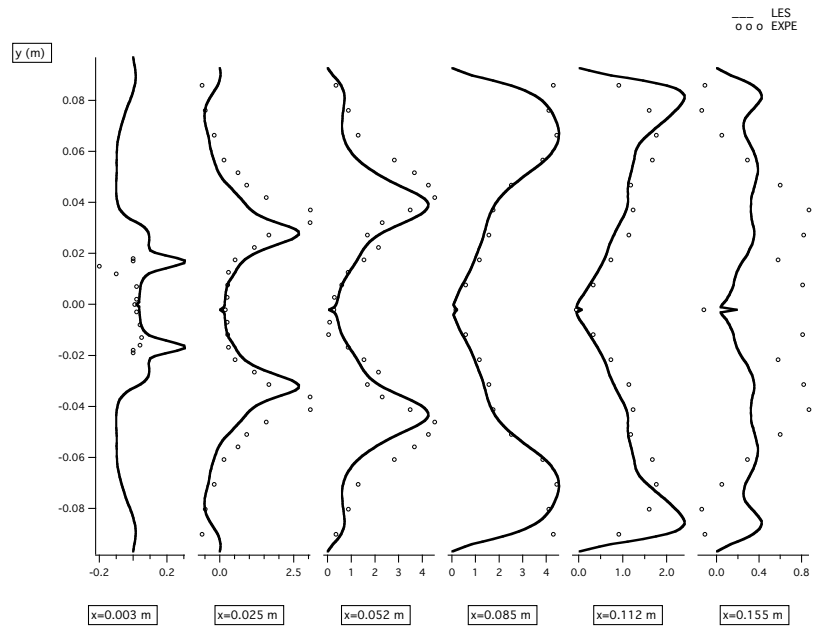


FIG. 7.27 – Vitesse radiale liquide. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (o)

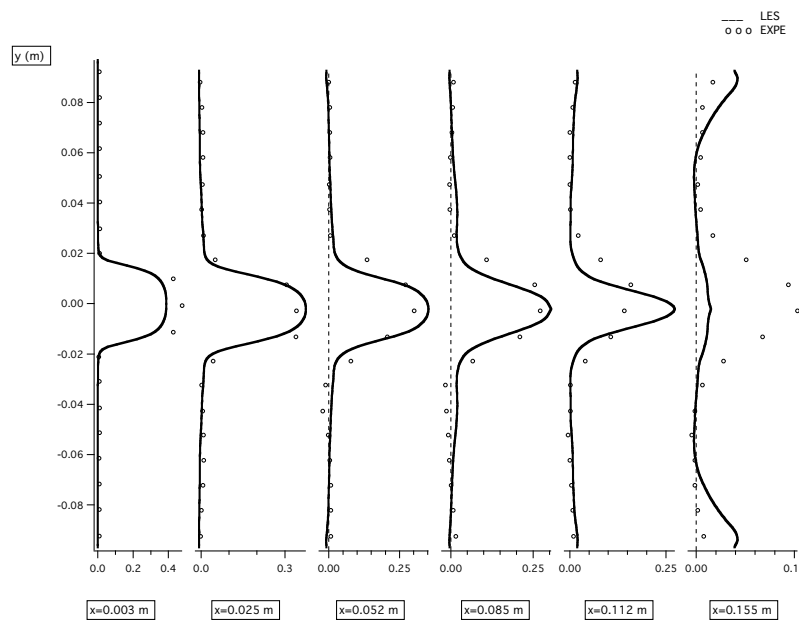


FIG. 7.28 – QDM axiale liquide. AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (○)

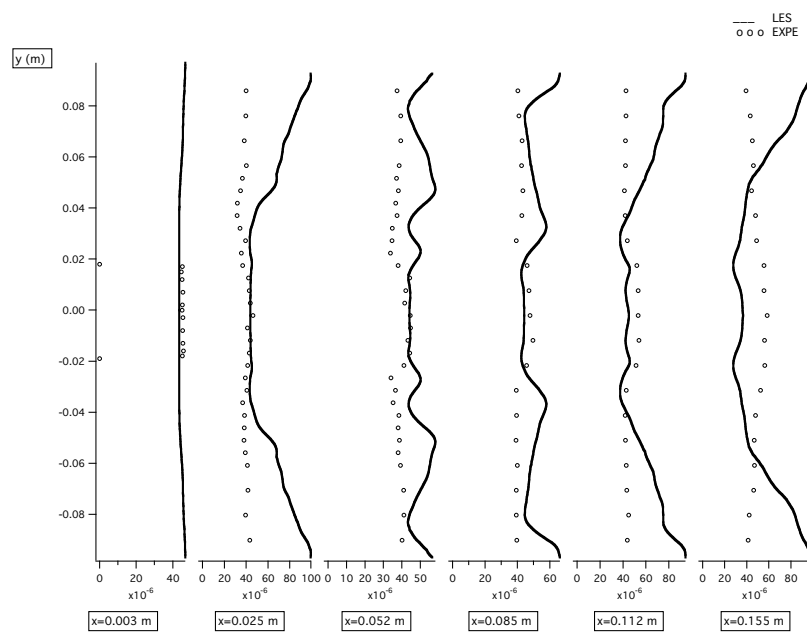


FIG. 7.29 – Diamètre caractéristique des particules (d_{00}). AVBP_TPF(-), Sommerfeld[70] (○)

Une valeur faible de τ_{conv} signifie au niveau de la physique modélisée, une moins grande sensibilité aux phénomènes de séparation des particules. Cela a plusieurs conséquences au niveau macroscopique. La Fig. 7.30 propose et compare une représentation schématique en coupe des cas A et B pour mieux comprendre ces conséquences. Les chiffres cirés indiquent de façon qualitative la valeur locale du diamètre, les flèches indiquent, à l'intérieur du jet, la trajectoire des particules et, à l'extérieur, les zones de recirculation du gaz.

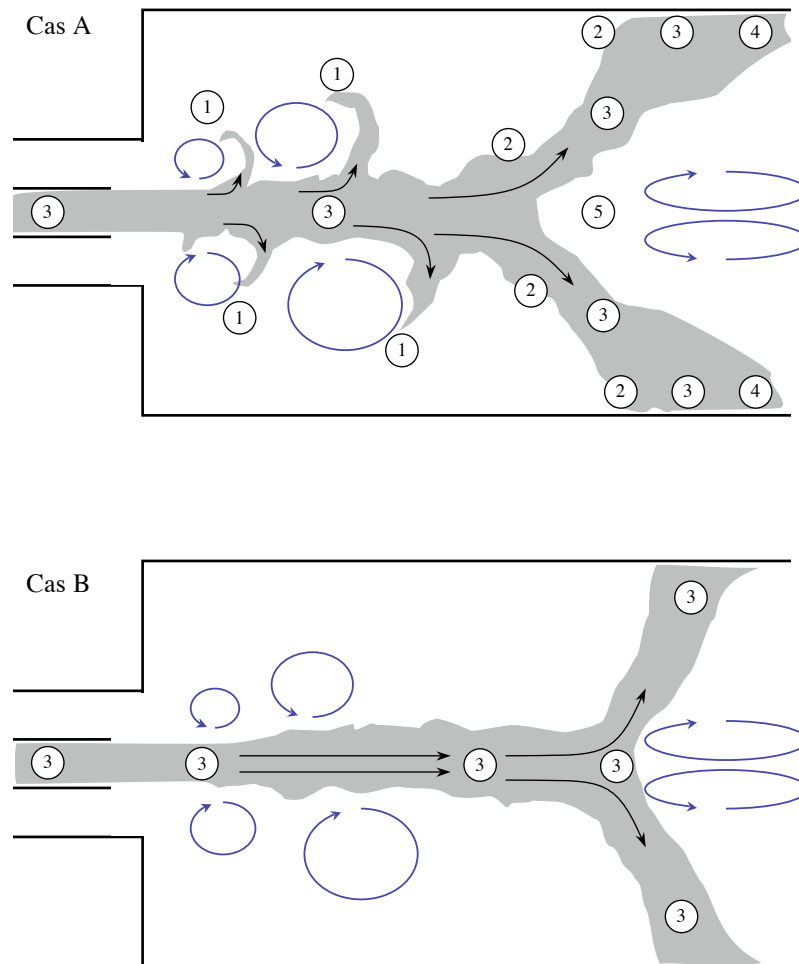


FIG. 7.30 – Représentation schématique des deux écoulements.

Pour le cas A, les particules de faible diamètre (1) sont arrachées très tôt par les tourbillons de bord du jet. Ensuite, les particules plus grosses mais encore assez légères (2-3) sont centrifugées. Enfin, la séparation de diamètre dans la zone cen-

trifugée tend à moins dévier les particules lourdes (4) que les légères (2). Seules les particules très lourdes (5) atteignent le bord de la zone de recirculation.

Pour le cas B, la faible valeur de τ_{conv} empêche toute séparation. Il n'y a pas d'arrachement de particules (la QDM ne s'élargit pas) et cela laisse le diamètre inchangé au sein du jet (3). De plus, l'absence d'interactions avec la turbulence gazeuse ne déstabilise pas le spray liquide qui garde une forme cylindrique et suit une trajectoire quasi rectiligne. En fait, l'impossibilité d'avoir des effets de séparation produit une simulation équivalente à un cas monodisperse pour lequel on aurait un diamètre constant environ égal au diamètre moyen d'injection du cas polydisperse (ici $\sim 45\mu m$). C'est ce qui explique la sous prédiction du diamètre sur l'axe $y = 0$ (Fig. 7.29). En l'absence d'effet de séparation, il ne peut y avoir de variations du diamètre local. Le diamètre d'injection est conservé.

Le fait d'utiliser un paramètre τ_{conv} trop faible 'tue' les effets polydisperses. L'écoulement semble alors insensible aux effets du gaz car les petites particules ne sont plus arrachées. On observe des résultats équivalents à un cas monodisperse. On retrouve donc bien le comportement attendu lors de la construction du modèle, à savoir le contrôle au travers du paramètre τ_{conv} la facilité avec laquelle les particules peuvent avoir des trajectoires différentes.

Chapitre 8

Application à un cas industriel : VESTA

La chambre de combustion VESTA (Turboméca - groupe SNECMA) est une configuration industrielle présentant un écoulement turbulent rotatif coaxial. Le but de cette simulation est de faire une démonstration de la robustesse du modèle dans une géométrie plus complexe que le cas Sommerfeld-Qiu et d'illustrer l'effet de la polydispersion du spray sur un cas réaliste. L'écoulement est schématisé à la Fig. 8.1.

Cette géométrie est typique des chambres de combustion d'hélicoptères. L'injection de carburant se fait à l'aide d'un atomiseur situé un peu plus en amont du plan 1. Le swirl généré à partir de la zone 2 sert à stabiliser la flamme 6 et engendre une zone de recirculation très puissante qui remonte quasiment jusqu'au plan d'entrée. Les jets de dilution 3 et 4 permettent à la fois un approvisionnement en comburant pour la flamme et une dilution des gaz brûlés en direction de la sortie 5 pour augmenter la durée de vie des composants de la chambre. Les effets de la flamme ne sont pas étudiés ici. On s'intéresse uniquement à la dispersion des gouttes de carburant dans la chambre.

8.1 Configuration

Le maillage réalisé pour cette configuration comporte 160000 noeuds et 1 millions de cellules tétraédriques. Une visualisation des tailles de mailles par rapport à la

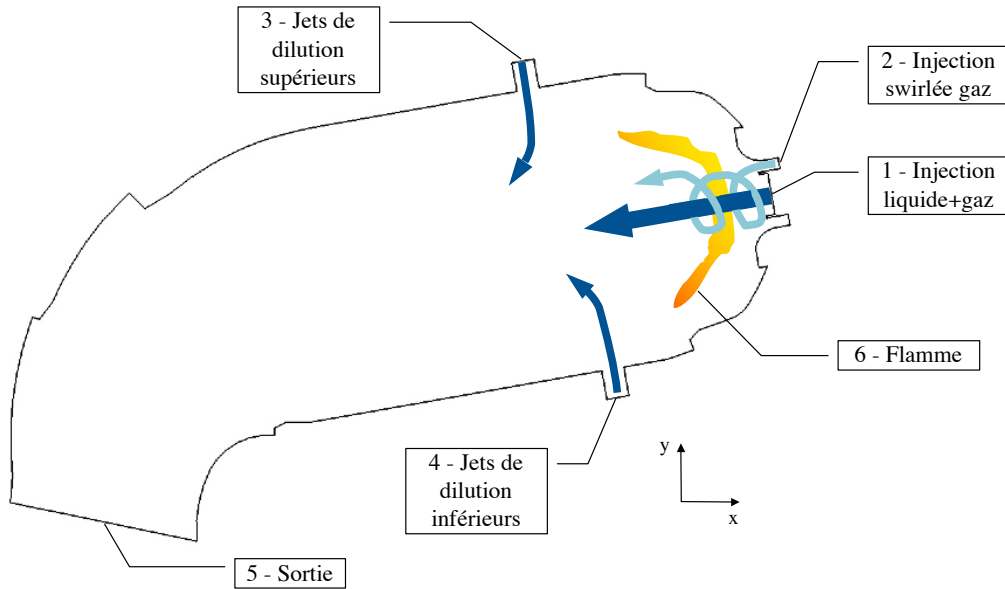


FIG. 8.1 – Schématisation de l'écoulement

taille de configuration et du maillage de l'injecteur sont présentées à la Fig. 8.2.

Les paramètres physiques retenus pour ce cas sont :

- $\rho_2 = 780 \text{ kg/m}^3$
- $\nu_1 = 1.788 \cdot 10^{-5}$
- $\tau_{drag}(d_{00}) = 0.025 \text{ s}$
- $\tau_{conv}(d_{00}) = 7 \cdot 10^{-4} \text{ s}$

Ce qui conduit aux valeurs suivantes des grandeurs adimensionnelles :

- $St(d_{00}) \sim 4$
- $d_{St} \sim 2$
- $Re_p(d_{00}) \sim 4$

Les conditions limites utilisées sont répertoriées dans le tableau 8.1 et correspondent à la Fig. 8.3. Les plans situés de part et d'autre de la configuration utilisent des conditions de périodicité (cf Fig. 8.2).

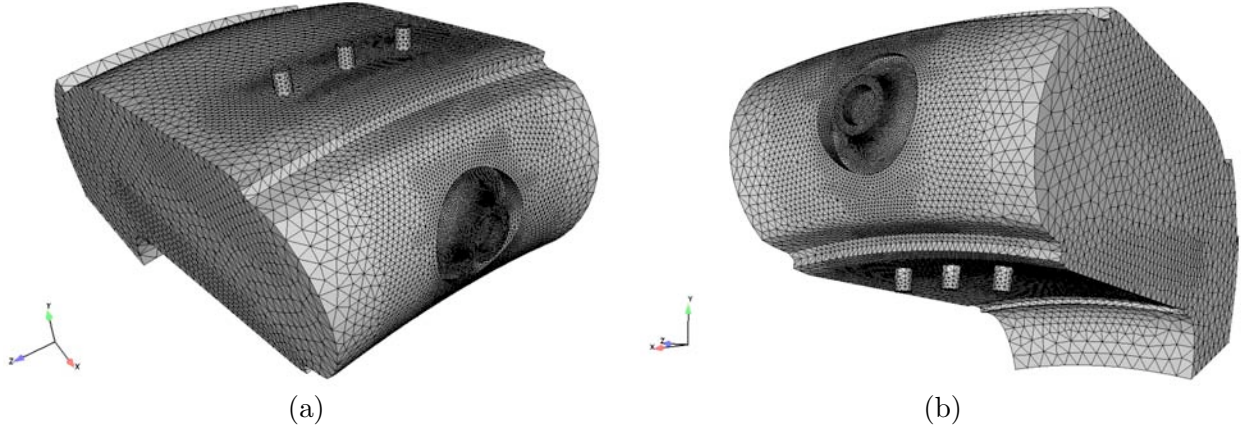


FIG. 8.2 – Maillage de peau du domaine calculé
 (a) Vue de dessus (b) Vue de dessous

Conditions limites :	Gaz	Liquide
Entrée intérieure (1) : Valeurs imposées :	relax sur $u_{1,n}, u_{1,t}$ et T_1 $\ \vec{u}_1\ = 15m/s$, injection normale	relax sur $u_{2,n}, u_{2,t}, d_{00}, \hat{\sigma}$ et n_2 $\ \vec{u}_2\ = 15m/s$
Entrée extérieure (2) : Valeurs imposées :	relax sur $u_{1,n}, u_{1,t}$ et T_1 $\ \vec{u}_1^n\ = 15m/s, \ \vec{u}_1^t\ = 17m/s$, in- jection rotative	mur glissant
Entrée supérieure (3) : Valeurs imposées :	relax sur $u_{1,n}, u_{1,t}$ et T_1 $\ \vec{u}_1\ = 15m/s$, injection normale	mur glissant
Entrée inférieure (4) : Valeurs imposées :	relax sur $u_{1,n}, u_{1,t}$ et T_1 $\ \vec{u}_1\ = 15m/s$	mur glissant
Sortie (5) : Valeurs imposées :	relax sur p_1 $p_1 = 101350Pa$	convection pure
Autre (6) :	mur glissant adiabatique	mur glissant

TAB. 8.1 – Résumé des conditions limites

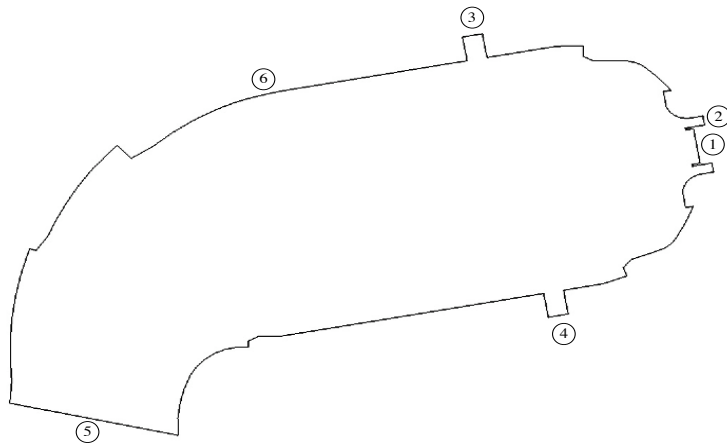


FIG. 8.3 – Visualisation des conditions limites

8.2 Résultats

Deux simulations, l'une monodisperse effectuée à $d_{00,inj} = 30\mu m$ et l'autre polydisperse effectuée à $d_{00} = 32\mu m$ avec $\hat{\sigma} = 0.4$ sont présentées.

Six coupes indicées de A à F sont effectuées sur le plan médian ($z = 0$) comme indiqué sur la Fig. 8.4. Le système de coordonnées (x, y) est transformé de façon à coïncider avec le système (x_θ, y_θ) afin de faciliter la lecture des résultats.

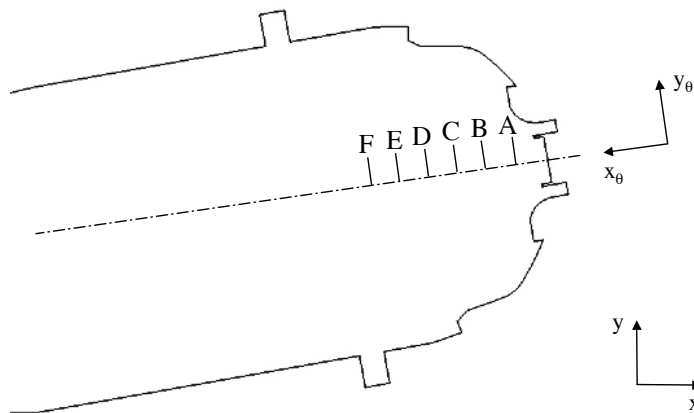


FIG. 8.4 – Coupes de résultats et changement de repère

Les résultats obtenus pour les vitesses gazeuses sont présentés aux Figs. 8.5-8.7.

Les résultats sont typiques d'un écoulement rotatif. On remarque que la zone de recirculation est très forte (avec des vitesses de retour de l'ordre de $10m/s$) et qu'elle remonte également très haut en amont de la configuration. La vitesse selon y_θ montre une ouverture très rapide de l'écoulement gazeux (coupe A) ainsi que l'influence des jets de dilution supérieurs (coupes E et F). Quant à la vitesse de rotation (selon z), à part en zone proche de l'injection, elle est assez faible. Cela est sûrement dû à l'élargissement brusque qui a tendance à ralentir fortement les vitesses tant selon la normale au plan d'injection qu'au niveau de la rotation.

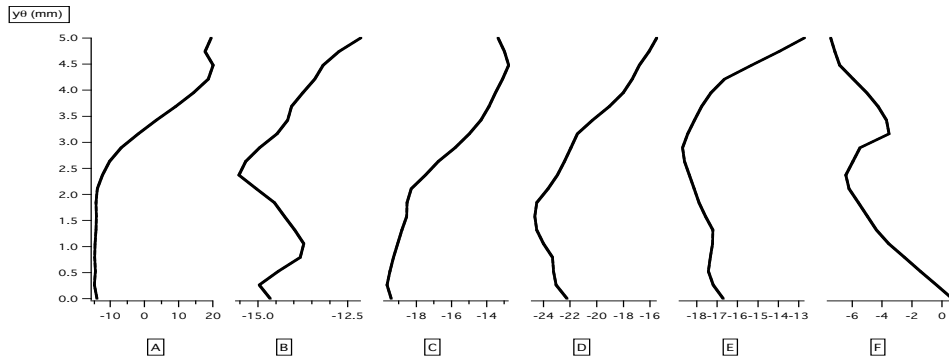


FIG. 8.5 – Vitesse moyenne selon x_θ en m/s .

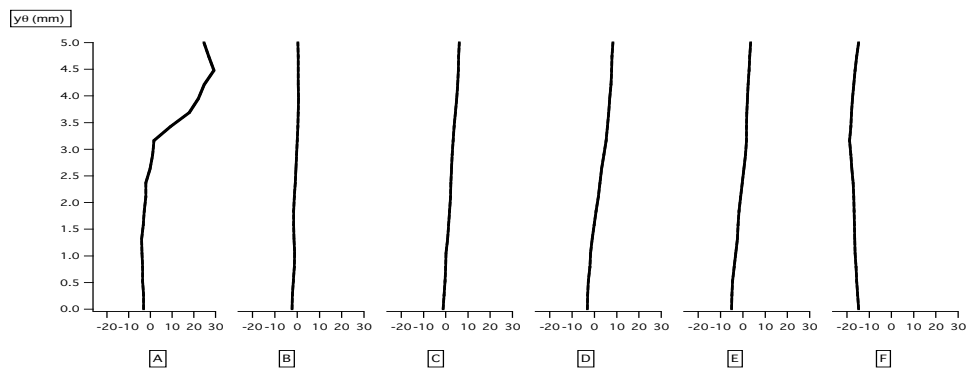


FIG. 8.6 – Vitesse moyenne selon y_θ en m/s .

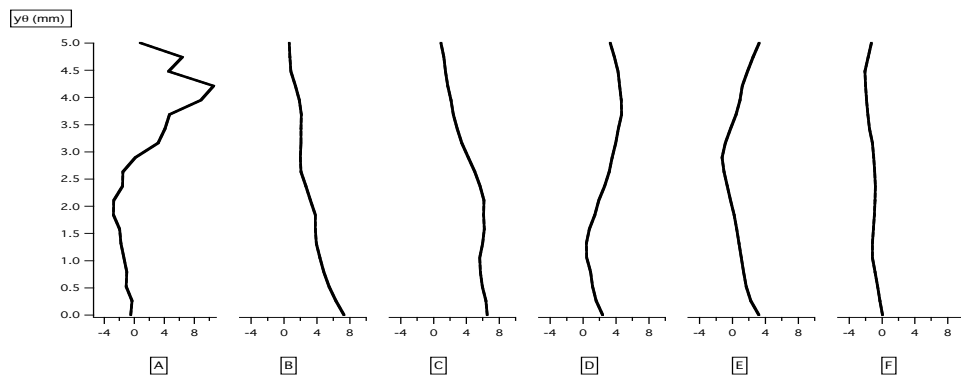


FIG. 8.7 – Vitesse moyenne selon z en m/s .

Les résultats obtenus pour la fraction massique liquide sont présentés à la Figs. 8.8.

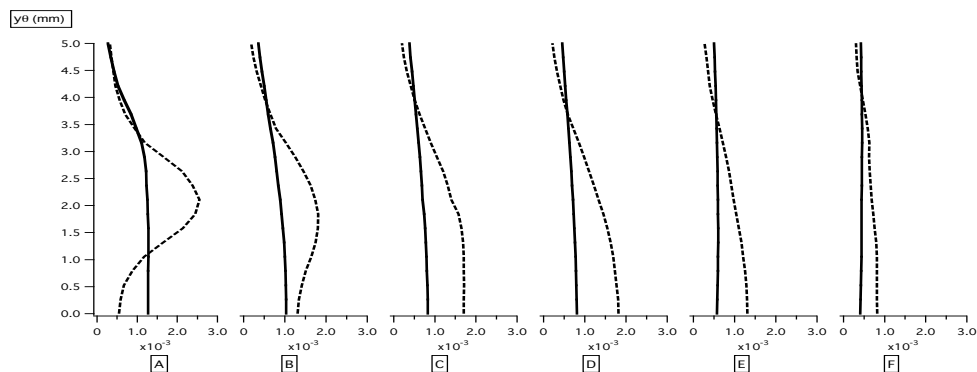


FIG. 8.8 – Fraction massique liquide. monodisperse (- -), polydisperse (-)

On remarque que le jet polydisperse est beaucoup moins sensible à l'écoulement rotatif gazeux et qu'il est plus réparti sur toute la largeur de la coupe. Ce n'est pas étonnant dans la mesure où ce jet est la superposition de nombreuses particules de diamètres différents et que donc on observe une superposition de jets monodisperses, plus ou moins sensibles à la traînée en fonction du St des particules qui le compose.

Les résultats obtenus pour les deux vitesses liquides, c'est-à-dire la vitesse monodisperse et la vitesse moyenne polydisperse sont présentés aux Figs. 8.9-8.11.

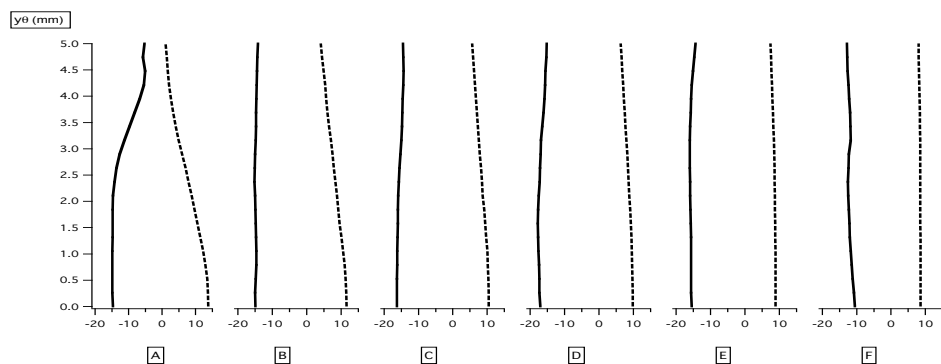


FIG. 8.9 – Vitesse selon x_θ en m/s . monodisperse (- -), polydisperse (-)

Le point qui frappe immédiatement est la différence évidente à la fois de comportement et de niveau entre les deux vitesses selon x_θ . Au niveau de la coupe A, tout

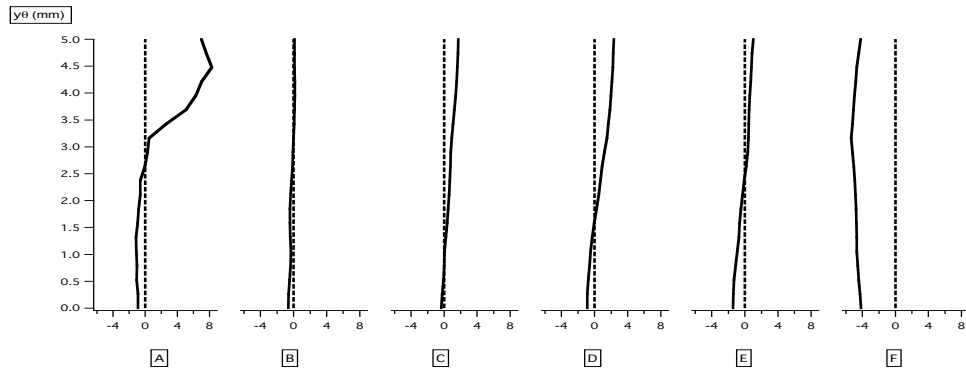


FIG. 8.10 – Vitesse selon y_θ en m/s . monodisperse (- -), polydisperse (-)

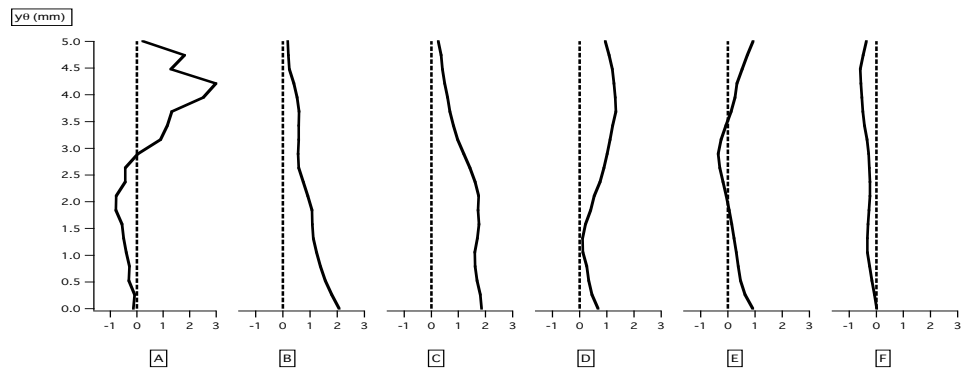


FIG. 8.11 – Vitesse selon z en m/s . monodisperse (- -), polydisperse (-)

particulièrement, là où le monodisperse indique une pénétration, le polydisperse donne une forte recirculation. Et sur le reste du domaine jusqu'à la coupe F, les vitesses sont tout simplement de même amplitude mais de signe opposé. La prise en compte de nombreuses tailles de gouttes dans la vitesse moyenne a tendance, pour ce cas, à donner un champ de vitesse beaucoup plus sensible à la traînée. Cela peut être dû en partie au choix du paramètre τ_{conv} mais la tendance est beaucoup trop forte pour lui en attribuer la seule responsabilité. Il s'agit plutôt, vu la forte variance de diamètre ($\hat{\sigma} = 0.4$), d'une réelle contribution de l'opération de moyenne sur l'ensemble des diamètres.

Selon les autres axes, les différences de vitesse sont moins marquées. On remarque cependant très nettement l'effet de la traînée sur la vitesse polydisperse sur la coupe A dans la zone $y_\theta > 3mm$. Il y a une forte corrélation entre cette 'bosse' et celle vue dans la même zone sur la vitesse gazeuse. En fait, il se trouve qu'à cet endroit seules des gouttes de taille très faible qui relaxent très vite vers la vitesse du gaz sont présentes, comme le montre la Fig. 8.12.

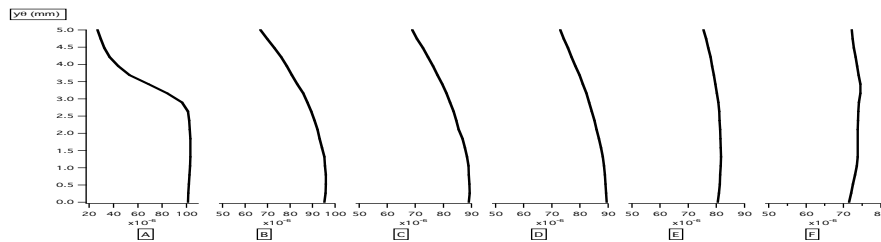


FIG. 8.12 – Diamètre polydisperse en μm .

Les résultats obtenus pour la vitesse reconstituée correspondant au diamètre $30\mu m$ sont présentés aux Figs. 8.13-8.15 et comparés à la vitesse monodisperse.

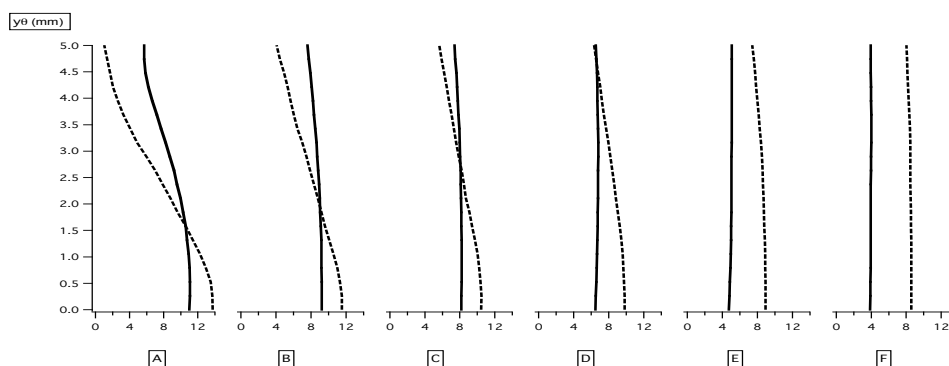


FIG. 8.13 – Vitesse selon x_θ en m/s . monodisperse (- -), reconstitué (-)

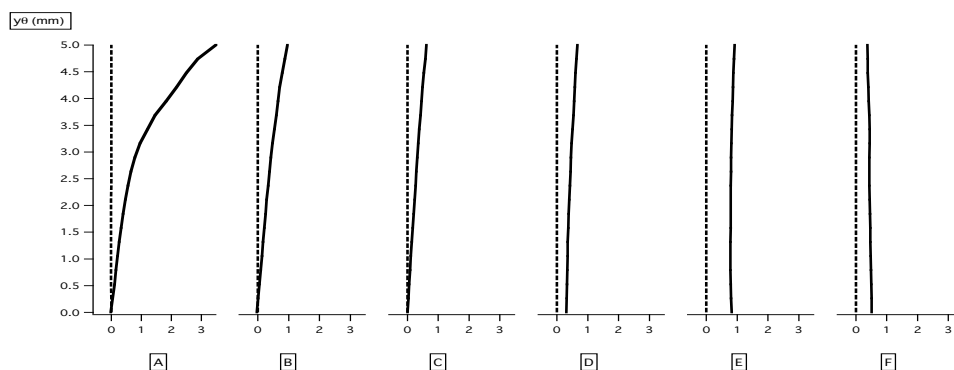


FIG. 8.14 – Vitesse selon y_θ en m/s . monodisperse (- -), reconstitué (-)

La procédure de reconstruction permet de retrouver de façon stupéfiante les bons profils monodisperses. on constate cette fois-ci un très bon accord au niveau des tendances (mêmes variations) et des niveaux (même signe et même ordre de grandeur). Alors que le champ de vitesse moyenne laissait penser à un mauvais comportement du modèle, on constate qu'il n'en est rien et que, au contraire de l'approche intuitive, cette vitesse représente tout à fait l'écoulement moyen.

En rentrant dans les détails, on peut remarquer que les amplitudes ne sont pas tout à fait prédites et les profils reconstruits sont, de manière générale, plus 'plats'.

Par ailleurs, la pénétration du jet reconstitué semble moindre que ce qu'indique le calcul $30\mu m$. Pourtant, la valeur du paramètre τ_{conv} est plutôt faible par rapport ce

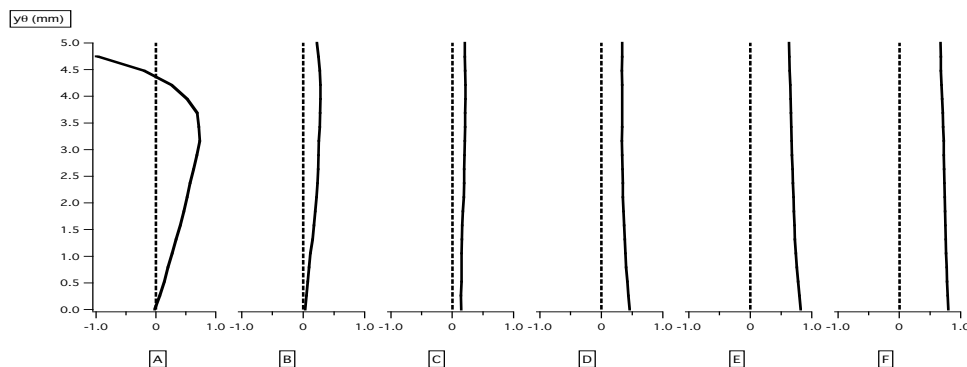


FIG. 8.15 – Vitesse selon z en m/s . monodisperse (- -), reconstitué (-)

que donne son estimation initiale (*cf* section 9.1.4). On s’attendrait donc à avoir un comportement plutôt trop fortement balistique, c’est-à-dire correspondant à des particules de fort St . Or la vitesse reconstituée montre un comportement encore un peu trop proche de la vitesse du gaz.

L’hypothèse la plus probable est que la forte zone de recirculation qui remonte très en amont agit comme un bouclier qui empêche les particules de progresser et également comme une toupie qui les centrifuge. Pour les gouttes, ces deux effets combinés forment une perturbation beaucoup plus forte que la simple action d’une traînée transverse comme celle présentée au chapitre 6. Il n’est donc pas étonnant de constater qu’il faudrait encore diminuer le paramètre τ_{conv} (sans doute d’environ un tiers) pour obtenir un accord meilleur.

Ces résultats permettent de valider la démarche qui consiste à déterminer le paramètre τ_{conv} à partir d’un calcul monodisperse dans le cas où l’expérience fait défaut pour son ajustement. C’est un point très intéressant du point de vue de la méthodologie de calcul car cela signifie que l’on peut initier un calcul polydisperse par une simulation à variance nulle et passer ensuite à la variance nominale en utilisant les résultats obtenus sur le champ de vitesse à variance nulle pour déterminer τ_{conv} . Cette méthode permet d’économiser les coûts informatiques d’un transitoire numérique (le temps que met l’écoulement à s’installer dans le domaine et qui représente souvent plus de 50% du temps de calcul) et donne de plus au final deux jeux complets de résultats.

Il est par ailleurs très intéressant de constater que chercher à deviner le champ de vitesse probable d’un diamètre donné à partir du seul champ de vitesse moyenne polydisperse peut conduire non seulement à des valeurs de niveau inexacts mais surtout à des erreurs complète de tendance et d’orientation. Ce point est crucial quant à l’interprétation de résultats en vue de garantir la stabilisation d’une flamme

par exemple. Raisonner en polydisperse sur la seule vitesse moyenne peut conduire à penser que le carburant circule dans le sens opposé au sens réel. De même, raisonner à partir d'un calcul monodisperse pour estimer par analogie les champs correspondant à d'autres diamètres peut conduire à négliger une forte partie du carburant se déplaçant en sens contraire des particules du diamètre choisi. Il est beaucoup plus pertinent de se donner quelques diamètres caractéristiques et de reconstituer leurs champs de vitesse. La forme de la loi log-normale (donnée par d_{00} et $\hat{\sigma}$) donne alors les populations relatives de chaque diamètre et l'on peut interpréter les résultats. Les très bons résultats donnés par la procédure de reconstruction montrent qu'au travers des deux effets successifs du modèle de transport et de la reconstruction, ce sont les bonnes hypothèses qui ont été utilisées et qui permettent d'obtenir un modèle qui agit dans le sens de la physique.

Si l'on ajoute que l'évaporation en régime turbulent génère une polydispersion de fait et que la flamme est extrêmement sensible aux variations locales de richesse de carburant, la différence de répartition du carburant (Fig. 8.8) entre un cas monodisperse et un cas polydisperse montre que l'aspect polydisperse ne peut pas être ignoré pour effectuer des simulations de combustion diphasique turbulente.

Troisième partie

Conclusions

Chapitre 9

Bilan du modèle polydisperse et axes de développement

9.1 Bilan du modèle polydisperse

9.1.1 Apport du modèle

L'aspect polydisperse d'un écoulement diphasique turbulent engendre une plus grande dispersion spatiale des particules transportées. En pratique, cela conduit à une répartition très différente du carburant dans une chambre de combustion par rapport au cas monodisperse et donc à des régimes de flamme ou des limites de stabilité modifiés.

Il est donc crucial que le premier élément important du modèle développé dans ce travail soit sa capacité à capturer la dispersion différenciée de la phase liquide en fonction de la taille des particules.

Le second point intéressant de ce modèle est la possibilité de mettre en évidence différents phénomènes instationnaires caractéristiques du polydisperse, comme l'arrachement de petites particules au jet principal par les structures turbulentes gazeuses.

Pour autant, cette meilleure prédiction de la physique de l'écoulement ne se fait pas au prix d'une forte augmentation du temps de calcul. En effet, seule une équation de transport supplémentaire est nécessaire. Par exemple, si l'on considère un calcul diphasique réactif complet avec deux réactions et six espèces, le surcoût du polydisperse par rapport au monodisperse ne représente pas plus de 5% à 10%.

Par ailleurs, comme montré sur le cas VESTA (*cf* chapitre 8), ce modèle est assez robuste pour être utilisé sur des configurations complexes.

Enfin, les possibilités de reconstruction de grandeurs particulières à partir des gran-

deurs moyennes offrent des perspectives très intéressantes. Il semble évident que la possibilité d'effectuer un seul calcul pour obtenir le comportement de chaque classe de particules au lieu d'un calcul par classe est un progrès considérable. Dans un but de dimensionnement ou d'étude d'impact, cette propriété peut permettre de limiter les cycles d'étude en R&D par exemple.

9.1.2 Point à traiter avec précautions en polydisperse

Etant donné l'influence très forte du gaz sur le liquide au travers du couplage de traînée sur toutes les échelles de diamètre, un des points essentiels pour obtenir un transport valide de toutes les particules (en diphasique en général, mais en polydisperse tout particulièrement) est le soin à apporter au calcul du champ de vitesse gazeuse. De la même façon qu'en Lagrangien l'évaluation de la vitesse 'vue' nécessite des traitements et des modèles spécifiques, la vitesse gazeuse Eulérienne conditionne tellement fortement les résultats sur la phase liquide qu'un modèle ne peut être évalué de façon indépendante sans l'assurance d'une totale validité de cette vitesse.

Le deuxième point important est la précision avec laquelle les reconstructions de diamètre ou de variance doivent être effectuées. Les relations de reconstructions présentent de forts risques numériques du fait de la présence de puissances non entières et d'exponentielles. Il convient donc de réduire au maximum (ou de compenser) les erreurs numériques sur le transport des grandeurs permettant ces reconstitutions afin de ne pas les amplifier au travers des reconstructions.

Enfin, par expérience, il faut absolument éviter les forts gradients entretenus (c'est à dire imposé par la géométrie ou l'écoulement). Ces gradients sont sources d'instabilités que les opérateurs de traitement de front ne peuvent résoudre puisque les causes sont justement entretenues. Ces phénomènes se rencontrent typiquement à l'aval d'une séparation dans la zone dite de 'couche de mélange'. Les gradients de diamètre orthogonaux à l'écoulement imposent au point de contact entre les deux zones de fortes différences de traînée, donc de vitesse, qui forme une instabilité sur deux points continûment entretenue.

9.1.3 Termes prépondérants

Le terme prépondérant devant tous les autres pour la détermination du champ de vitesse est la traînée. Les effets polydisperses (qui sont pourtant modélisés sous la forme d'une intégration des effets de la traînée au niveau particulaire) ont une influence assez faible sur ce champ.

A l'inverse, pour le champ de diamètre et encore plus pour le champ de fraction

massique, c'est le paramètre τ_{conv} qui conditionne l'écoulement à grande échelle, prenant le pas même sur la traînée (*cf* Fig. 7.30).

Pour les fluctuations temporelles de vitesse, c'est un mélange de ces deux comportements qui est observé, fruit de la décomposition de l'équation (7.5). De même, la nature de l'expression de la vitesse reconstituée (*cf* Eq. (4.47)) qui met en jeu le champ d_{St} impose un comportement composé des deux effets majoritaires : traînée et flux décorrélés.

9.1.4 Protocole d'estimation du paramètre τ_{conv}

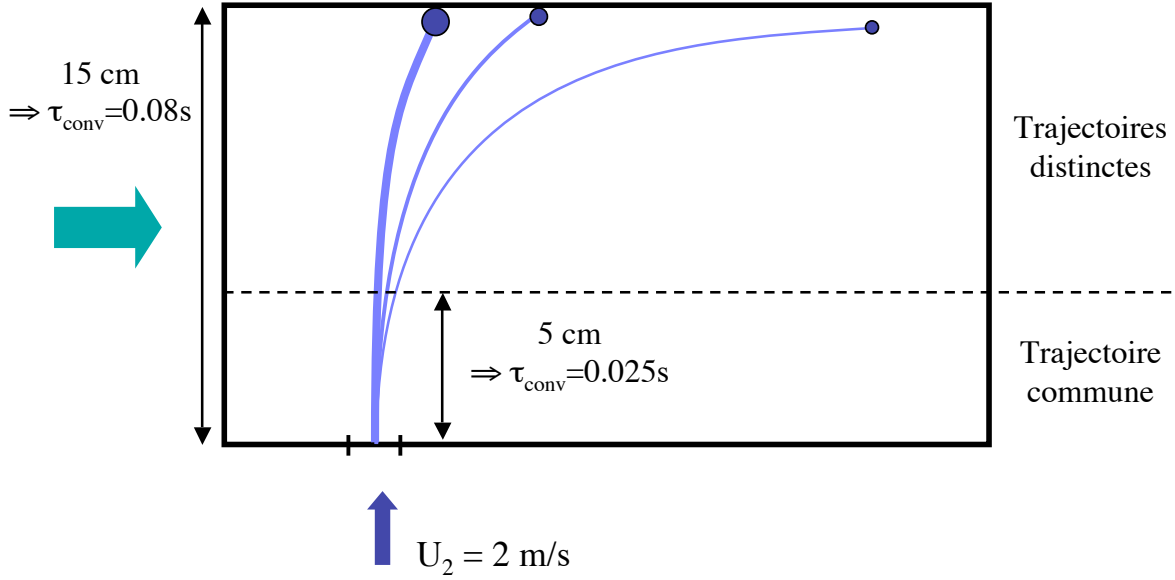
Le temps τ_{conv} est le paramètre essentiel qui gère la totalité de la dispersion différenciée dans l'écoulement. Il est donc crucial pour l'utilisation de ce modèle d'être en mesure d'évaluer ce paramètre *a priori*.

Cette analyse n'a pu être effectuée plus tôt car la connaissance d'un seul cas ne pouvait suffire à dégager une tendance générale. C'est au regard des trois cas étudiés et de leurs différences que des approches plus simples, comme celle énoncée au chapitre 6, ont pu être infirmées ou précisées.

Ainsi, pour reprendre ce qui a été énoncé précédemment (chap. 6), prendre en compte l'orthogonalité de la traînée par rapport à la trajectoire initiale peut suffire dans des cas très particuliers mais devient très délicat à définir à partir du moment où les particules sont transportées dans un écoulement turbulent. Il existe une définition plus générale qui englobe la précédente en restant toutefois valide pour les écoulements plus complexes. Il s'agit de considérer le temps caractéristique qu'il va falloir aux particules du nuage initial pour avoir des trajectoires distinctes à l'échelle de l'écoulement global. Dans le cas du spray liquide en soufflage transverse, étant donné que les particules légères s'écartent relativement vite de leur trajectoire initiale pour s'aligner sur la vitesse du gaz alors que les plus lourdes ne sont pas affectées, on observe cette séparation assez rapidement et un temps τ_{conv} de 0.08s est beaucoup trop important.

La Fig. 9.1 donne une représentation graphique pour estimer le temps à prendre en compte. Les particules sont représentées proportionnelles à leur taille respective, de même que l'épaisseur de leur trajectoire respective.

Si l'on prend en compte la période pendant laquelle les particules de faible diamètre ont une vitesse proche de leur vitesse d'injection (avec une évaluation à l'aide d'une tangente par exemple), on trouve une valeur de 0.025s, ce qui est très proche de la valeur 0.02s obtenue comme valeur optimale pour ce cas. Si l'on ajoute que le modèle n'est sensible qu'à des variations logarithmiques de τ_{conv} (c'est-à-dire qu'il faut faire varier τ_{conv} d'un facteur 2^n et non pas n pour voir apparaître 'n paliers' de comportement différents), ce temps est une très bonne estimation.


 FIG. 9.1 – Estimation *a priori* de la valeur du paramètre τ_{conv} .

Ce temps de trajectoire commune est en quelque sorte le temps qu'il faut pour que les particules les plus petites du nuage initial soient dans un régime différent de celui des particules de taille maximale, et il est possible de le définir analytiquement. En reprenant la solution analytique de la traînée (Eq. 6.2), on constate qu'il faut un temps $t = \tau_{drag}$ pour relaxer de 63% vers la vitesse gazeuse, $t = 2\tau_p$ pour relaxer de 86% et $t = 3\tau_{drag}$ pour relaxer de 95%. On peut donc considérer qu'il y a différence de régime entre les particules de diamètre d_2^1 et d_2^2 lorsque

$$\begin{cases} t \sim k\tau_{drag}(d_2^1) \\ t \ll \tau_{drag}(d_2^2) \end{cases} \quad (9.1)$$

avec k constante à déterminer. En effet, dans le cas où ces deux conditions sont respectées, la particule de diamètre d_p^1 possède une vitesse proche de celle du gaz alors que la particule de diamètre d_p^2 suit toujours sa vitesse initiale (à 10% près). Ceci constitue donc bien une divergence de trajectoire.

Dans un nuage polydisperse, on sait que $d_2 \sim d_{00}e^{-2\hat{\sigma}}$ est représentatif des diamètres faibles et $d_2 \sim d_{00}e^{2\hat{\sigma}}$ est représentatif des diamètres fort (*cf* section 4.5), d'où les deux conditions du système (9.1) peuvent s'exprimer sous la forme :

$$\begin{cases} t \sim k \frac{\rho_2}{18\mu_1} (d_{00}e^{-2\hat{\sigma}})^2 \\ t \ll \frac{\rho_2}{18\mu_1} (d_{00}e^{2\hat{\sigma}})^2 \end{cases} \quad (9.2)$$

Pour qu'il existe une solution, il faut donc que le temps écoulé respecte les deux conditions ci-dessus, ce qui implique :

$$\begin{aligned}
 k \frac{\rho_2}{18\mu_1} (d_{00}e^{-2\hat{\sigma}})^2 &\ll \frac{\rho_2}{18\mu_1} (d_{00}e^{2\hat{\sigma}})^2 \\
 \Leftrightarrow ke^{-4\hat{\sigma}} &\ll e^{4\hat{\sigma}} \\
 \Leftrightarrow k &\ll e^{8\hat{\sigma}} \\
 \Leftarrow k &\sim \frac{e^{8\hat{\sigma}}}{8}
 \end{aligned} \tag{9.3}$$

Cela donne la valeur de k . Et, dans ce cas, à partir de l'instant $t \sim k\tau_{drag}(d_2^1)$, on peut considérer qu'il y a séparation.

Ceci permet de conclure qu'il est pertinent de choisir comme valeur de départ :

$$\tau_{conv} = \frac{\rho_2}{144\mu_1} d_{00}^2 e^{4\hat{\sigma}} \tag{9.4}$$

Une application numérique donne :

- pour le jet liquide en soufflage transverse, la valeur $\tau_{conv} = 0.25s$ pour une valeur optimale heuristique trouvée de $0.20s$
- pour le cas Sommerfeld-Qiu, la valeur $\tau_{conv} = 10.10^{-3}$ pour 15.10^{-3} utilisé actuellement (avec l'intuition qu'il faudrait en effet légèrement baisser cette valeur si on pouvait multiplier les calculs)
- pour le cas VESTA, la valeur $\tau_{conv} = 15.10^{-4}$ pour 7.10^{-4} utilisé actuellement.

On obtient le temps voulu à moins de 35% près dans deux cas et à 50 % près dans le troisième. Il semblerait même qu'on puisse affirmer que les écoulement rotatifs ont tendance à nécessiter une valeur inférieure (d'environ 33%) à celle donnée par cette méthode (*cf* les cas Sommerfeld et VESTA). Si l'on ajoute à nouveau que le modèle n'est sensible qu'à des variations logarithmique de τ_{conv} , ces temps donnent au final un très bon ordre de grandeur du paramètre τ_{conv} *a priori* pour initier les calculs.

Enfin, pour être cohérent au niveau de la nomenclature et puisqu'il ne correspond plus à un phénomène de convection, ce temps devrait logiquement s'appeler désormais τ_{sep} et non plus τ_{conv} .

Dans les écoulement complexes, on peut souhaiter multiplier les gages de sécurité. Une seconde méthode moins immédiate mais quasi automatique est alors possible. Un premier calcul est fait avec une injection monodisperse de diamètre d_{mono} . Cela donne un champ de vitesse \vec{v}_{mono} . Puis, on effectue un second calcul en cherchant à caler τ_{conv} de telle sorte que la vitesse reconstruite associée à d_{mono} , $\vec{u}_\tau(d_{mono})$, corresponde au résultat du premier calcul \vec{v}_{mono} . On fait alors l'hypothèse que, si \vec{v}_{mono} et $\vec{u}_\tau(d_{mono})$ coïncident, le paramètre τ_{conv} est bien calé et les champs de vitesse polydisperses sont valables pour tous les diamètres. C'est cette démarche qui est

utilisée au chapitre 8 avec des résultats très satisfaisants.

C'est l'automatisme et la simplicité conceptuelle de cette méthode qui font sa force. Utilisée en complément de la méthode basée sur le temps de séparation, elle permet d'avoir à disposition deux outils basés sur des approches différentes pour justifier le choix initial de τ_{sep} (ou τ_{conv}).

9.2 Perspectives

1. Un élément intéressant pourrait être de proposer une forme non symétrique pour la PDF de vitesse en déformant la gaussienne par exemple. Cela reviendrait à prendre en compte le fait que les décorrélations de vitesse des particules ont une direction privilégiée et ne sont de plus pas répartie de façon symétrique dans cette direction. La détermination de $E_{\tau,i}$ ferait dans ce cas apparaître des moments de vitesse décorrélée de la forme $\langle u''_{2,i}u''_{2,i} \rangle_2$ (non démontré ici). Il faudrait alors transporter ces moments et non leur somme E_{QB} . Cela alourdirait le système de deux équations supplémentaires, mais pourrait apporter un gain de précision.
2. En première approche, la PDF de température a été choisie indépendante du diamètre. Or la description mathématique du phénomène d'évaporation se rapproche assez de celle de la traînée dans la mesure où il existe une température initiale conservée par les gouttes de fort diamètre et une température d'équilibre (à température de gaz environnant constante) atteinte très rapidement par les gouttes de faible diamètre. Ceci laisse à penser que la méthodologie utilisée pour la vitesse conditionnée par le diamètre \vec{u}_τ est transposable à θ_Γ . Cependant, l'extrême non linéarité des termes sources d'évaporation par rapport à la température d'une goutte complexifie énormément ce travail. Cela nécessiterait un développement mathématique beaucoup plus poussé que pour l'évaluation des termes sources de traînée, mais pourrait surtout permettre de modéliser avec précision l'évolution de la température dans une flamme de spray polydisperse par exemple.
3. Avec la PDF de vitesse présumée, il est possible de faire se croiser des particules de taille différente tant que leur vitesse respective vérifie les hypothèses de la PDF présumée (faible $St \Rightarrow$ vitesse proche de celle du gaz, fort $St \Rightarrow$ vitesse proche de la vitesse d'injection). Par contre, la forme log-normale de la PDF de diamètre impose une sorte de continuité dans la répartition des diamètre qui empêche la présence de deux populations distinctes de particules de diamètre différent. Une PDF de diamètre à deux pics pourrait permettre la prise en compte de ce type d'écoulements. Afin de ne pas alourdir le nombre

d'équations transportées, on pourrait envisager d'avoir le même paramètre de largeur $\hat{\sigma}$ pour les deux pics et il suffirait d'une équation supplémentaire (par exemple celle du moment S_1 qui n'a comme terme source que le terme d'évaporation) pour fermer le système. De façon implicite, une égalité des diamètres caractéristiques de chaque pic signifierait qu'on a localement une PDF à un seul pic. Il reste à savoir si le système posséderait toujours les bonnes propriétés permettant des développements analytiques poussés.

4. Il pourrait être intéressant de coupler différemment l'équation du transport quasi-brownien avec la forme de \vec{u}_τ en évaluant les termes à fermer à partir des intégrations de u_τ et non pas le modèle proposé par Kaufmann [27]. Il faudrait alors évaluer le terme $\mathbb{T}(u''_{2,j}) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_2 \rho_2 \langle u''_{2,i} u''_{2,j} \rangle_2$ (entre autres) non pas à l'aide d'une analogie avec le tenseur des contraintes des équations de Navier-Stokes mais tout simplement par intégration de la PDF présumée, comme cela est fait pour les termes $\mathbb{T}(\frac{1}{m_2})$ et $\mathbb{T}(\frac{\sigma_2}{m_2})$. Cela permettrait d'évaluer laquelle de ces deux méthodes est la mieux adaptée (et peut-être également dans quels cas) aux écoulements polydisperses.
5. Enfin, afin de prendre en compte de façon plus précise les spécificités des écoulements, il pourrait être utile de chercher à utiliser un paramètre τ_{sep} local. Peut-être qu'utiliser simplement l'estimation (9.4) en chaque point suffirait. Le but d'une telle complexification serait de ne plus avoir à définir ce paramètre en cherchant à dégager une tendance générale pour l'écoulement global et de pouvoir ainsi prendre en compte toutes les spécificités locales de l'écoulement (recirculation, jet transverses multiples, zone de mélange...).

Bibliographie

- [1] Aldama, A. A. (1990). Filtering techniques for turbulent flows simulation, Springer-Verlag.
- [2] Apte, S. V., Mahesh, K., Moin, P., Oefelein, J.-C. (2003). "Large-eddy simulation of swirling particle-laden flows in a coaxial-jet combustor." *Int. Journal of Multiphase Flow* 29 : 1311-1331.
- [3] Babinsky, E. and Sojka, P. E. (2002). "Modeling drop size distributions." *Prog. in Energy and Comb. Sci.* 28 : 303-329.
- [4] Basset, A. M. (1888). *A Treatise on Hydrodynamics*, Cambridge university Press.
- [5] Bermejo, R. and Conde, J. (2001). "Analysis of a class of quasi-monotone and conservative semi-Lagrangian advection schemes." *Numerische Mathematik* 87(4) : 597 - 623.
- [6] Boussinesq, J. (1903). *Theorie Analytique de la Chaleur*. Paris., L'Ecole Polytechnique.
- [7] Chapman, S. and Cowling, T. G. (1939, digital reprint 1999). *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University Press.
- [8] Chassaing, P. (2000). *Turbulence en mécanique des fluides*. Toulouse, Cepadues-Editions.
- [9] Colin, O. and Rudgyard, M. (2000). "Developpement of High-Order Taylor-Galerkin Schemes for LES." *Journal of Turbulence* 162 : 338-371.
- [10] Crow, E. and Shimizu, K. (1988). *Lognormal distribution : theory and applications*. New York.
- [11] Drew, D. A. (1983). "Mathematical modelling of two-phase flow." *Annual Review of Fluid Mechanics* 15 : 261-291.

- [12] Drew, D. A. and Passman, S. (1999). *Theory of multicomponent fluids*, Springer.
- [13] Ducros, F., Nicoud, F., Schonfeld, T. (1997). "LES of compressible flows on hybrid meshes."
- [14] Elghobashi, S. (1994). "On predicting particle-laden turbulent flows." *Appl Sci Res* 52 : 309-329.
- [15] Elghobashi, S. and Truesdell, G. (1993). "On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles." *Physics of Fluids* 5(7) : 1790-1801.
- [16] Faeth, G. M. (1983). "Evaporation and combustion of sprays." *Prog. Energy Combust. Sci.* 9 : 1-76.
- [17] Faivre, V. and Poinso, T. (2004). "Experimental and numerical investigations of jet active control for combustion applications." *Journal of Turbulence* 5(025).
- [18] Favre, A. (1969). "Statistical equations for turbulent gases." *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics* : 231-266.
- [19] Ferry, J. and Balachandar, S. (2001). "A fast Eulerian method for disperse two-phase flows." *Int. Journal of Multiphase Flow* 27 : 1199-1226.
- [20] Ferziger, J. H. (1977). "Large eddy simulations of turbulent flows." *AIAA Journal* 15 : 1261-1267.
- [21] Fevrier, P. (2000). *Etude numerique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses des particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. Thèse, INP-Toulouse.
- [22] Fevrier, P., Simonin, O., Squires, K.D. (2005). "Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially-uncorrelated random distribution : theoretical formalism and numerical study." *Journal of Fluids Mechanics* To be published.
- [23] Gilks, W. R., Richardson, S., Spiegelhalter, D.J. (1996). *Markov chain Monte Carlo in practice*. London, Chapman & Hall.
- [24] Grad, H. (1949). "On the kinetic theory of rarified gases." *Communications on Pure and Applied Mathematics* 2(4) : 331-407.
- [25] Hinze, J. O. (1975). *Turbulence*. New York, Mac Graw Hill.
- [26] Jameson, A., Schmidt, W., Turke, E. (1981). "Numerical solution for the

Euler Equations by finite volume methods using Runge-Kutta time stepping method schemes." *AIAA Journal* 81 : 1259.

[27] Kaufmann, A. (2004). Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler-Euler des écoulements réactifs diphasiques. CERFACS. Toulouse, INPT.

[28] Kramer, P. (2001). "A review of some Monte-Carlo methods for turbulent systems." *Monte Carlo Methods and Applications* 7(3-4) : 229-244.

[29] Kuo, K. (2004). Principles of combustion, John Wiley & Sons Inc.

[30] Lamb, R. G., Hogo, H., Reid, L.E. (1979). A Lagrangian approach to modeling air pollutant dispersion : Development and testing in the vicinity of roadway, Technical report, EPA Research Report, EPA-600/4-79-023.

[31] Lefebvre, A. (1998). Gas Turbine Combustion, Taylor & Francis Inc.

[32] Legier, J.-P., Poinot, T., Varoquie, B., Lacas, F. and Veynante, D. (2001). Large eddy simulation of a non premixed turbulent burner. IUTAM symposium on turbulent mixing and combustion, Kingston, Canada.

[33] Leith, C. (1974). "Theoretical skill of Monte-Carlo forecasts." *Mon. Weather Revue* 102 : 409-418.

[34] Lesieur, M. and Métais, O. (1996). "New trends in large-eddy simulations of turbulence." *Annual Review of Fluid Mechanics* 28 : 45-82.

[35] Ling, W., Chung, J. N., Troutt, T.R., Crow, C.T.. (1998). "Direct numerical simulation of a three dimensional temporal mixing layer with particle dispersion." *Journal of Fluids Mechanics* 358 : 61-85.

[36] Marmottant, P. and Villermaux, E. (2001). "Ligament assisted drop formation." *A Gallery of Fluid Motion*, by M Samimy, K Breuer, P Steen, L G Leal, Cambridge University Press.

[37] Mashayek, F. and Pandya, R. V. R. (2003). "Analytical description of particle/droplet-laden turbulent flows." *Prog. Energy Combust. Sci.* 29 : 329-378.

[38] Maxey, M. and Riley, J. (1983). "Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow." *Physics of Fluids* 26(4).

[39] Minier, J.-P. and Peirano, E. (2001). "The pdf approach to turbulent poly-dispersed two-phase flows." *Physics Report* 352 : 1-214.

[40] Moin, P., Squires, K., Cabot, W., Lee, S. (1991). "A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport." *Physics of Fluids A* 3(11) : 2746-2757.

[41] Mugele, R. and Evans, H. (1951). "Droplet size distribution in sprays." *Ind Eng Chem* 43(6) : 1317-1324.

[42] Nair, R., Cote, J. and Stiniforth, A. (1999). "Monotonic cascade interpolation for semi-Lagrangian advection." *Quart. J. Roy. Meteorolog. Soc.* 125 : 197.

[43] Nair, R., Scroggs, J., and Semazzi, F.H.M. (2003). "A forward-trajectory global semi-Lagrangian transport scheme." *Journal of Turbulence* 190 : 275–294.

[44] Nicoud, F. and Ducros, F. (2000). Subgrid-scale stress modelling based on the square of velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, Springer Science + Business Media, 62 : 183-200.

[45] Nukiyama, S. and Tanasawa, Y. (1939). "Experiments in on the atomization of liquids in air stream. Report 3 : on the droplet-size distribution in an atomized jet." *Trans. Soc. Mech. Eng. Japan* 5 : 62-67.

[46] Obukhov, A. M. (1959). "Description of turbulence in terms of Lagrangian variables." *Adv. Geophys.* 6 : 113-116.

[47] Odar, F. and Hamilton, W. S. (1964). "Forces on a sphere accelerating in a viscous fluid." *Journal of Fluids Mechanics* 18 : 302 -314.

[48] Paloposki, T. (1994). "Drop size distributions in liquid sprays." *Acta Polytech Scand, Mech Eng Ser* : 114.

[49] Pierce, C. D. and Moin, P. (1998). Large eddy simulation of a confined coaxial jet with swirl and heat release. 29th Fluid Dynamics Conference, Albuquerque, NM.

[50] Plateau, J. (1873). *Statique expérimentale et théorique des liquides*, Gauthier-Villars et Cie.

[51] Poinot, T. and Lele, S. K. (1992). "Boundary conditions for compressible unsteady flows." *Journal of Turbulence* 101(104-129).

[52] Pope, S. (1976). "The probability approach to modeling of turbulent reacting flows." *Combustion and Flames* 27 : 299-312.

[53] Rancic, M. (1994). "An efficient, conservative, monotonic remapping for semi-Lagrangian transport algorithm." *Monthly Weather Revue* 122 : 1213–1217.

[54] Rani, S. (2004). "Preferential concentration of particles in isotropic turbulence : a comparison of the Lagrangian and the equilibrium Eulerian approach." *Powder Technology* 141 : 109-118.

[55] Rani, S. and Balachandar, S. (2003). "Evaluation of the equilibrium Eulerian approach for the evolution of particle concentration in isotropic turbulence." *Int.*

Journal of Multiphase Flow 29 : 1793-1816.

[56] Rayleigh (1879). On the instability of jets. Proceedings of the London Mathematical Society, London.

[57] Reveillon, J., Pera, C., Massot, M. and Knikker, R. (2004). "Eulerian analysis of the dispersion of evaporating polydispersed sprays in a statistically stationary turbulent flow." Journal of Turbulence 1 : 1-27.

[58] Robert, A. (1981). "A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations." Atmos. Ocean. 19 : 35.

[59] Roos, F. W. and Wilmarth, W. W. (1971). "Some experimental results on sphere and disk drag." AIAA Journal 9 : 285-291.

[60] Rosin, P. and Rammler, E. (1933). "The laws governing the fineness of powdered coal." J Inst Fuel 7 : 29-36.

[61] Sagaut, P. (2000). Large eddy simulation for incompressible flows, Springer-Verlag.

[62] Samenfink, W. (1995). Atomization and Sprays, Short Course.

[63] Savart, F. (1833). "Mémoire sur la constitution des veines liquides lancées par des orifices circulaires en mince paroi." Ann. Chim. Phys. 53 : 337-386.

[64] Schiller, L. and Nauman, A. (1935). "A drag coefficient correlation." VDI Zeitung 77 : 318-320.

[65] Schluter, J. and Pitsch, H. (2002). Consistent boundary conditions for integrated LES/RANS simulations : LES inflow conditions. Stanford, Center for turbulence Research.

[66] Schmehl, R., Maier, G., et al. (2000). CFD Analysis of Fuel Atomization, Secondary Droplet Breakup and Spray Dispersion in the Premix Duct of a LPP Combustor. Eighth International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Pasadena, CA, USA.

[67] Simonin, O. (1996). Continuum modelling of dispersed turbulent two-phase flows. Lecture Series 1996-02, von Karman Institute for Fluid Dynamics.

[68] Simonin, O., Fevrier, P., et al. (2002). "On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos." Journal of Turbulence 3.

[69] Smagorinsky, J. (1963). "General circulation experiments with the primitive equations." Monthly Weather Revue 91(3) : 99-165.

[70] Sommerfeld, M. and Qiu, H. (1991). "Detailed measurements in a swirling particulate two-phase flow by a phase-Doppler anemometer." *Int. Journal Heat and Fluid Flow* 12 : 20-28.

[71] Stokes, G. (1851). "On the effect of the internal friction of fluids on the motion of a pendulum." *Trans. Camb. Phil. Soc.* 9 : 8-10.

[72] Tate, R. and Marshall, W. (1953). "Atomization by centrifugal pressure nozzles." *Chem Eng Prog* 49 : 169-174.

[73] Tchen, C.-M. (1947). Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid. Delft, De technische hogeschool.

[74] Vit, C., Flour, I., et al. (1999). Modelling of a confined bluff body flow laden with polydispersed solid particles. 2nd International Symposium on Two-Phase Flow Modelling and Experimentation, Italy, P. Di Marco and R. K. Shah.

[75] Wang, L.-P. and Maxey, M. (1993). "Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence." *Journal of Fluids Mechanics* 256 : 27-68.

[76] Weber, C. and Angew, Z. (1931). "The Decomposition of a Liquid Jet." *Math. Mech.* 11 : 136-154.

[77] Wiener, N. (1949). Extrapolation, interpolation and smoothing of stationary time series, M.I.T. press.

[78] Yeung, P. K. and Pope, S. (1988). "An algorithm for tracking fluid particles in numerical simulations of homogeneous turbulence." *Journal of Turbulence* 79(2) : 373-416.

[79] Zainoun, N. (2004). Contrôle dimensionnel des aérosols par piézoélectricité. XXIXème Congrès de la Société de Biomécanique, Créteil.

Références additionnelles

[80] Apte S. V. , Gorokhovski, M. , Moin, P. "LES of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup" *Int. Journal of Multiphase Flow* , 2003 , 29(9) :1503-1522.

[81] Enskog, D. (1917). "The Kinetic Theory of Phenomena in Fairly Rare Gases.", Dissertation, Upsala.

[82] Gouesbet G. ; Berlemont A. (1998) "Eulerian and Lagrangian approaches for predicting the behaviour of discrete particles in turbulent flows" *Progress in Energy*

and Combustion Science, 25(2) :133-159.

[83] Kamp A.M., Chesters A.K., Colin C. and Fabre J. (2001). "Bubble coalescence in turbulent flows : A mechanistic model for turbulence-induced coalescence applied to microgravity bubbly pipe flow." Int. Journal of Multiphase Flow 27(8) : 1363-1396.

[84] Laurent, F., Santoro, V., Noskov, N., Smooke, M.D., Gomez, A., Massot, M. "Accurate treatment of size distribution effects in polydisperse spray", Combustion Theory and Modelling 8(2) : 385-412.

[85] Laurent, F. and Massot, M. (2001) "Multi-fluid modelling of laminar polydisperse spray flames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods", Combustion Theory and Modelling, 5(4) : 537-572.

[86] Laurent, F., Massot, M. and Villedieu, P. (2004) "Eulerian multi-fluid modelling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays", Journal of Turbulence , 194(2) :505-543.

[87] Minier, J.P., Peirano, E., Chibbaro, S. (2004). "PDF model based on Langevin equation for polydispersed two-phase flows applied to a bluff-body gas-solid flow." Physics of Fluids 16(7) : 2419-2431.

[88] Ghosh, S., Hunt, J.C.R. (1998). "Spray jets in a cross-flow." Journal of Fluids Mechanics 365 : 109-136.