

CERFACS  
CFD - COMBUSTION



Sous la direction de Bénédicte CUENOT

# MODELISATION ET CALCUL DE JETS DIPHASIQUES

Rapport de stage de fin d'études  
Eléonore RIBER  
Juin 2003  
Ref : WN/CFD/03/72



Département Hydraulique et Mécanique des fluides  
ENSEEIH



## Résumé

La combustion diphasique dans les moteurs d'avion ou de voiture fait aujourd'hui l'objet d'études et de simulations numériques poussées. Le principal enjeu réside dans la réduction des émissions de polluants. Dans cette optique, il est nécessaire de caractériser l'injection de fuel liquide et son mélange avec l'air chaud.

Le stage a pour but de modéliser et de calculer un jet diphasique turbulent avec la formulation eulérienne. Il s'est déroulé autour de trois thématiques principales. Tout d'abord, une étude bibliographique a permis de comprendre le modèle à deux fluides. L'implémentation de la traînée dans le code AVBP\_TPF du CERFACS a fait l'objet d'une étape de validation qui a permis de prendre en main le code et de comprendre les effets du couplage gaz-liquide induit par cette force. Enfin, le calcul d'un jet diphasique turbulent a permis d'obtenir des résultats qualitatifs qui ont pu être comparés avec des travaux incluant un modèle lagrangien. La fin du stage portera sur la modélisation et le calcul d'une configuration expérimentale. Des comparaisons quantitatives seront à cette occasion réalisées.

## Remerciements

Je tiens à remercier sincèrement Thierry Poinot pour m'avoir donné l'opportunité d'effectuer mon stage au sein de l'équipe CFD du CERFACS, dans une atmosphère de confiance et de sympathie.

J'exprime toute ma reconnaissance à Bénédicte Cuenot et André Kaufmann qui m'ont fait partager leur expérience en modélisation numérique des écoulements diphasiques. J'ai apprécié la qualité de nos échanges et la finesse de leurs analyses et de leurs conseils.

Ces remerciements s'adressent naturellement à Jean-Baptiste Mossa, Stéphane Pascaud et Matthieu Boileau qui m'ont accueillie au sein de l'équipe diphasique et n'ont jamais hésité à m'apporter leur aide précieuse.

Je n'oublie pas enfin l'ensemble des permanents, thésards et post-doctorants qui ont toujours été disponibles et contribuent tous à rendre l'ambiance sympathique.



# Introduction

## 0.1 Le CERFACS : Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique

Le CERFACS, créé en 1987, est un laboratoire reconnu au niveau international dans le domaine du calcul scientifique à haute performance. Il héberge une centaine de chercheurs permanents et post-doctorants de toutes nationalités, ainsi que de nombreux stagiaires, doctorants et visiteurs.

Le CERFACS est constitué de cinq équipes :

- climatologie,
- traitement du signal,
- électromagnétisme,
- algorithmes et calcul parallèle,
- mécanique des fluides numérique (CFD).

Cette dernière équipe est elle-même divisée en deux pôles de recherche : aérodynamique et combustion. Les principales activités de l'équipe combustion, dans laquelle j'ai été intégrée, sont :

- la Simulation Numérique Directe (SND) pour l'étude des interactions flamme/turbulence avec chimie complexe,
- la Simulation aux Grandes Echelles (SGE) pour étudier le mélange, les instabilités de combustion et les interactions flamme/paroi, en combustion gazeuse et diphasique gaz/liquide.

Le domaine de la combustion diphasique est en pleine expansion et ses applications industrielles sont nombreuses. La compréhension et la modélisation des jets issus des injecteurs diphasiques est au coeur de ce projet de fin d'études. Ce contexte d'études est présenté en section 0.2.

## 0.2 Contexte d'études

Dans les moteurs actuels (avions (M88), voitures (Injection Directe Essence)), le combustible est injecté sous forme liquide et l'air chaud est injecté séparément. Le spray de gouttelletes se réchauffe, s'évapore et produit une vapeur de combustible qui se mélange à l'air avant de brûler. Généralement, l'écoulement environnant est turbulent. L'équipe "Combustion" du CERFACS développe depuis 1992 un code parallèle de simulation aux grandes échelles des écoulements gazeux réactifs en géométrie complexe. Ce code, appelé AVBP, est aujourd'hui employé pour des

calculs dans des turbines à gaz et des foyers aéronautiques pour des entreprises telles que Turboméca, Snecma, Siemens, Aérospatiale, Alstom ou l'IFP. Aujourd'hui, l'étude des écoulements diphasiques constitue l'un des enjeux majeurs de la combustion, notamment dans l'optique de réduire les émissions de polluants. Dans ce but, il est entre autres indispensable de caractériser l'injection de fuel liquide et son mélange avec l'air chaud. C'est pourquoi le CERFACS a décidé d'étendre son code de calcul à la combustion diphasique où le carburant dans la chambre existe sous forme liquide.

Pour traiter la phase liquide des écoulements diphasiques en calcul numérique, deux classes d'approche sont envisageables : le modèle Lagrangien ou Eulérien. L'approche Lagrangienne considère les inclusions comme des inclusions discrètes, les suit dans leur mouvement et calcule le bilan des forces sur chaque particule. Chaque particule est une particule "statistique", c'est-à-dire qu'elle représente une classe de gouttes. Du fait des difficultés rencontrées pour mener des calculs à haute performance avec cette méthode, elle n'est pour l'instant pas envisageable pour des calculs SGE en géométrie complexe. L'approche Eulérienne semble mieux adaptée puisqu'elle utilise une formulation continue, résolue par les mêmes algorithmes que la phase gazeuse.

Ce stage s'inscrit plus particulièrement dans l'étude de jets diphasiques avec la formulation eulérienne. Il a pour objectif de modéliser et de calculer un jet diphasique turbulent puis de comparer les résultats de notre code AVBP\_TPF avec les résultats donnés par un modèle lagrangien et des résultats expérimentaux. La section 0.3 détaille les étapes de la démarche suivie lors de ce projet de fin d'études.

### 0.3 Objectifs du stage

Se familiariser avec un code en développement a constitué la première étape. Plusieurs cas tests monophasiques calculés avec la dernière version du code AVBP monophasique ont permis d'acquérir une méthode de travail nécessaire pour contribuer efficacement au développement du code diphasique au sein d'une équipe de chercheurs et thésards. Des bases de calcul parallèle ont été acquises dans le cadre d'une formation dispensée par le CINES de Montpellier. Parallèlement, une étude bibliographique s'est avérée indispensable pour mieux comprendre la formulation eulérienne de la combustion diphasique.

L'étude du jet diphasique turbulent s'est déroulée en deux principales étapes :

- La validation des équations sur la phase liquide du modèle à deux fluides et de leur codage dans AVBP\_TPF est présentée dans la section 3 et se décompose elle-même en 3 sous-parties :
  - validation 0D temporelle de la traînée
  - validation 1D en régime permanent de la traînée
  - résolution numérique 1D de l'équation de Burgers
- La démarche et les résultats du calcul du jet diphasique turbulent font l'objet de la section 4. Ils permettent de caractériser le comportement du liquide vis-à-vis du gaz.

# Chapitre 1

## Le modèle eulérien à deux fluides

### 1.1 Rappel des équations locales instantanées

Un mélange diphasique peut être subdivisé en régions purement monophasiques, continues, séparées par des interfaces supposées infiniment minces et sans masse (cf. [15]). Dans chacune de ces régions, les équations locales de la mécanique des fluides s'appliquent.

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

$$\text{Conservation de la quantité de mouvement} \quad : \quad \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\sigma_{ij} + \rho g_i \quad (1.2)$$

$$\text{Conservation de l'enthalpie} \quad : \quad \frac{\partial}{\partial t}\rho h + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = -\frac{\partial}{\partial x_j}q_j + S \quad (1.3)$$

où les variables sont définies de la manière suivante :

- $\rho$  est la densité du fluide considéré,
- $u_j$  sa vitesse dans la direction  $j$ ,
- $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}$  le tenseur des contraintes,
- $\tau_{ij}$  la partie dissipative du tenseur des contraintes,
- $p = \rho r T$  la pression qui suit la loi des gaz parfaits,
- $g_i$  l'accélération de la pesanteur,
- $h$  l'enthalpie spécifique du milieu,
- $q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}$  le flux de chaleur par conduction,
- $T$  la température,
- $\lambda$  la conductivité thermique,
- $S$  la somme du taux local d'échauffement radiatif et des apports éventuels complémentaires d'énergie.

### 1.2 Approche statistique : définition des opérateurs de moyenne

On décrit brièvement dans cette partie le cadre mathématique du modèle eulérien à deux fluides. Les travaux présentés ci-dessous ont été développés par Gray, Howes et Whitaker (cf. [3], [5], [16] et [17]) et analysés par Simonin (cf. [14]).

### 1.2.1 La fonction caractéristique de phase

#### Définition

Le système local est composé de deux phases distinctes. Les différentes phases sont des fluides purs non miscibles. On identifie chaque phase  $k$  par la fonction caractéristique  $\chi_k$  telle que :

$$\begin{aligned}\chi_k(M, t) &= 1 \text{ si le point } M \text{ est dans la phase } k \text{ à l'instant } t \\ &= 0 \text{ sinon (cf. Fig. 1.1)}\end{aligned}$$

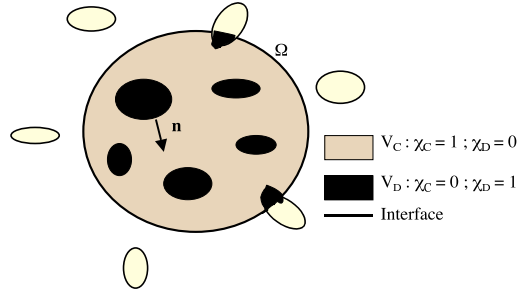


FIG. 1.1 – Croquis de définition de la fonction caractéristique de phase : cas d'une phase continue ( $k = c$ ) contenant des inclusions ( $k = d$ ).

#### Relations de commutation avec la dérivation

On démontre que l'opérateur de moyenne commute avec les dérivations spatiales et temporelles pour une fonction  $f$  dérivable. Les démonstrations se trouvent entre autres dans les publications de Whitaker [5], [16] [17] et de Gray [3].

### 1.2.2 Définition des grandeurs moyennes sur chaque phase

#### L'opérateur de moyenne

A chaque instant,  $\Omega$  est un volume de contrôle fictif constitué de l'union des volumes  $\Omega_k$  occupés par les phases  $k$ . On définit l'opérateur de filtrage en espace  $\langle \cdot \rangle$  par :  $\langle f \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} f d\Omega$ .

L'opérateur de filtrage vérifie trois propriétés indispensables pour la mise en équation du problème : linéarité, idempotence et commutativité.

#### Fraction volumique

On définit la fraction volumique de la phase  $k$  dans le volume de contrôle  $\Omega$  :

$$\alpha_k = \langle \chi_k \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \chi_k d\Omega \quad (1.4)$$

#### Moyenne de Favre

La moyenne eulérienne phasique classique d'une grandeur quelconque  $f$  sera notée  $F_k$  et sera définie par :

$$F_k = \frac{1}{\alpha_k} \langle f \chi_k \rangle = \frac{1}{\alpha_k \Omega} \int_{\Omega} f \chi_k d\Omega$$



L'écart à la moyenne  $f'$  est défini par :  $f' \chi_k = (f - F_k) \chi_k$   
Cependant, il est plus pratique de définir pour les problèmes à masse volumique variable, une moyenne pondérée par la masse volumique, appelée moyenne de Favre (cf. [15]) :

$$F_k = \frac{1}{\alpha_k \rho_k} \langle \rho f \chi_k \rangle \text{ et } f'' \chi_k = (f - F_k) \chi_k \quad (1.5)$$

### 1.3 Equations en grandeurs moyennes principales

#### Principe de la méthode

Le modèle eulérien à deux fluides régi par Eqs. (1.6), (1.7) et (1.8) est obtenu en appliquant les étapes suivantes aux équations de conservation (Eqs. (1.1), (1.2), (1.3)) :

1. Multiplication par la fonction caractéristique de phase  $\chi_k$  à gauche,
2. Application des relations de commutation là où ça a un sens physique (cas de la convection/diffusion),
3. Filtrage sur le volume de contrôle.

#### Equations du modèle à deux fluides

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_k \rho_k U_{j,k}) = \Gamma_k \quad (1.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k U_{i,k}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_k \rho_k U_{i,k} U_{j,k}) &= -\alpha_k \frac{\partial}{\partial x_j} P_k + \alpha_k \rho_k g_i \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \alpha_k T_{ij,k} - \langle \rho u_i'' u_j'' \chi_k \rangle \right] + I'_{i,k} + [U_{i,\sigma} - U_{i,k}] \Gamma_k \end{aligned} \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k H_k + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_k \rho_k U_{j,k} H_k) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \alpha_k Q_{j,k} + \langle \rho u_j'' h'' \chi_k \rangle \right] + \alpha_k S_k + \Pi_k \quad (1.8)$$

avec les définitions suivantes :

- $\rho_k$  est la densité de la phase  $k$ ,
- $U_{j,k}$  la vitesse moyenne de la phase  $k$  dans la direction  $j$ ,
- $\Gamma_k$  la densité volumique des apports de masse à la phase  $k$  résultant des échanges aux interfaces. Dans le domaine de la combustion,  $\Gamma_k$  représente le terme d'évaporation/condensation.
- $P_k$  est la pression moyenne de la phase  $k$ ,
- $T_{ij,k}$  la moyenne du tenseur des contraintes visqueuses sur la phase  $k$ ,
- $I'_{i,k}$  représente toutes les forces dues à l'interaction entre les deux phases,
- $U_{i,\sigma}$  la vitesse moyenne du flux de masse à travers l'interface,
- $H_k$  l'enthalpie moyenne de la phase  $k$  et  $h''$  la fluctuation correspondante,
- $Q_{j,k}$  le flux moyen de chaleur par conduction dans la direction  $j$ .

Les termes  $\Gamma_k$ ,  $I'_{i,k}$  et  $\Pi_k$ , caractéristiques des écoulements diphasiques, correspondent aux apports de masse, quantité de mouvement et enthalpie du fait des échanges entre phases aux interfaces. Ces quantités sont liées par les relations de bilan interfacial et s'expriment à partir des grandeurs moyennes principales à l'aide d'hypothèses simplificatrices ou lois de comportement. Etant donné leur complexité, les quantités  $I'_{i,k}$  et  $\Pi_k$  seront à ce titre données dans le chapitre 2 dans le cadre restreint de notre étude.

# Chapitre 2

## Cadre du stage

### 2.1 Simplification du modèle eulérien à deux fluides

#### 2.1.1 Hypothèses d'étude

Dans le cadre de ce stage, tant les cas tests de validation que les calculs de configurations académiques sont **bidimensionnels**. Ils font intervenir le **couplage direct-inverse** entre les deux phases par le seul biais de la **traînée**. En effet, la validation du phénomène d'évaporation fait l'objet d'un autre stage au sein du CERFACS.

Les autres hypothèses sont les suivantes :

- Une seule espèce liquide
- Aucune viscosité sur le liquide
- Ecoulement dilué :  $\alpha_l \ll 1$  et  $\alpha_g \sim 1$
- La correction en Reynolds dans le temps de relaxation des gouttes est négligée :  $\tau_p = \frac{\rho_l}{\rho_g} \frac{d^2}{18\nu_g}$ .

On note que pour des simplifications d'écriture, la moyenne eulérienne des vitesses  $U_k$  définie dans la section 1 sera dorénavant notée  $u_k$ .

#### 2.1.2 Bilan des forces sur une goutte

L'équation du mouvement d'une goutte dans un champ fluide turbulent peut être obtenue de manière générale à partir d'un bilan des forces exercées sur la goutte.

$$\rho_l V_l \frac{D}{Dt} \underline{u}_l(t) = \sum_k \underline{F}_k \quad (2.1)$$

avec les notations suivantes :

- $\rho_l$  est la masse volumique de la goutte,
- $\underline{u}_l$  son vecteur vitesse,
- $V_l$  son volume,
- $\underline{F}_k$  l'ensemble des forces appliquées à la goutte.

Dans le cadre de la combustion diphasique, nous étudions des gouttes sphériques dont la densité est largement supérieure à celle du fluide ( $\frac{\rho_l}{\rho_g} = 600$ ) et de taille inférieure ou du même ordre que les échelles de la turbulence. Plusieurs analyses théoriques (cf. Sommerfeld 2000) ont montré que dans ce cadre, la contribution des efforts de gradient de pression, de masse ajoutée (qui a pour origine les accélérations et décélérations successives de la goutte) et de la force de Basset (qui est liée à l'histoire des accélérations passées de la goutte) est négligeable devant l'agitation et la dispersion des gouttes. Par ailleurs, la taille des gouttes (de l'ordre de  $50 \mu m$ ) permet de négliger la force de portance. L'ensemble de l'étude étant bidimensionnelle, la gravité n'intervient pas dans nos calculs. Ainsi, **les gouttes sont essentiellement contrôlées par la force de traînée.**

Eq.(2.1) s'écrit donc :

$$\frac{D}{Dt} \underline{u}_l(t) = \underline{F}_D = \frac{1}{\tau_p} (\underline{u}_g - \underline{u}_l) \quad (2.2)$$

où  $\tau_p$  représente le temps de relaxation de la particule :  $\tau_p = \frac{\rho_l}{\rho_g} \frac{d^2}{18\nu_g}$

et  $Re_l$  le nombre de Reynolds caractéristique des gouttes :  $Re_l = \frac{|\underline{u}_g - \underline{u}_l|d}{\nu_g}$

### 2.1.3 Echange interfacial de quantité de mouvement

Le bilan des forces précédent permet d'exprimer le terme de transfert  $\underline{I}$  de quantité de mouvement. Il représente uniquement la force de traînée dans notre cas.

$$\underline{I} = \underline{I}_g = -\underline{I}_l = \underline{F}_D = \frac{1}{\tau_p} (\underline{u}_g - \underline{u}_l) \quad (2.3)$$

### 2.1.4 Echange interfacial d'enthalpie

On néglige la conduction de chaleur à l'interface. Puisque l'évaporation n'est par ailleurs pas prise en compte, le terme d'échange interfacial  $\Pi$  est nul :  $\Gamma = 0$

### 2.1.5 Récapitulatif des équations de Navier-Stokes diphasiques

#### Phase liquide

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_l \rho_l u_{j,l}) = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l u_{i,l} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_l \rho_l u_{j,l} u_{i,l}) = \frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} (u_{i,g} - u_{i,l}) \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_l \rho_l H_l + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_l \rho_l u_{j,l} H_l) = 0 \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (n u_{j,l}) = 0 \quad (2.7)$$

## Phase gazeuse

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_g \rho_g u_{j,g}) = 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g u_{i,g} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_g \rho_g u_{j,g} u_{i,g}) = -\frac{\partial P_g}{\partial x_j} - \frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} (u_{i,g} - u_{i,l}) \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g E_g + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_g u_{j,g} (\rho_g E_g + P_g)) = -u_{i,g} \frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} (u_{i,g} - u_{i,l}) \quad (2.10)$$

où  $E_g$  est définie comme la somme de l'énergie cinétique et de l'enthalpie du gaz :  $E_g = \frac{u_{i,g}^2}{2} + H_g$

## 2.2 L'outil numérique : AVBP\_TPF

Tous les calculs présentés dans ce rapport ont été effectués avec le code de calcul AVBP\_TPF du CERFACS. C'est un code de calcul parallèle qui résout le système non linéaire des équations de Navier-Stokes compressibles diphasiques de manière explicite en régime laminaire et turbulent. Il est écrit en FORTRAN 77 et est basé sur deux bibliothèques : l'une est chargée de la simulation numérique des équations de la mécanique des fluides et l'autre gère les aspects calcul à haute performance, notamment le parallélisme. Du point de vue numérique, AVBP\_TPF possède un schéma centré d'ordre 2. Les schémas de Lax Wendroff de type volumes finis et de Taylor Galerkin modifié de type éléments finis sont en cours d'implantation pour la phase gazeuse. L'intégration temporelle de tous ces schémas est assurée par un schéma de Runge-Kutta explicite à plusieurs étapes. Finalement, les conditions aux limites utilisées sont les conditions NSCBC (cf. [11]), connues pour leurs excellentes qualités acoustiques. Les détails des modèles se trouvent dans [12] et [1].

# Chapitre 3

## Validation

### 3.1 Etapes de l'étude

Ce sont les termes de couplage entre les deux phases qui font l'originalité des écoulements diphasiques. Leur puissance est telle qu'il est indispensable de décomposer les équations de Navier-Stokes en problèmes plus simples avant de calculer des géométries plus complexes. cette démarche de validation du code AVBP\_TPF en terme de traînée fait l'objet de cette partie.

Le but est donc de résoudre les équations Eqs. (2.4), (2.5), (2.6) et (2.7) données dans la section 2.1.5 qui tiennent compte des simplifications propres à notre étude. Dans cette optique, nous allons découper le problème en trois parties :

- L'objectif de la section 3.2 est d'étudier le problème 0D temporel avec traînée. Une correction de l'intégration temporelle est mise en oeuvre afin de valider le cas test.
- Dans la section 3.3, il s'agit de mener l'étude spatiale monodimensionnelle en régime permanent du problème traité dans la section 3.2 afin d'étudier l'influence du terme source de traînée. A cette occasion, on choisira une géométrie et des conditions initiales particulières afin de trouver une solution analytique approchée du problème.
- Enfin, dans la section 3.4, on se concentrera sur la résolution de l'équation de Burgers qui pose le problème de la résolution numérique d'un choc.

Les rapports internes des deux premiers cas tests se trouvent en Annexes A et B.

### 3.2 Traînée 0D : correction de l'intégration temporelle

#### 3.2.1 Présentation du problème

##### Résolution analytique

Dans le cas d'un problème temporel, le système d'équations Eqs. (2.4), (2.5), (2.6) et (2.7) d'une part et (2.8), (2.9) et (2.10) d'autre part est réduit à :

$$\frac{d}{dt}u_{i,l} = \frac{1}{\tau_p} (u_{i,g} - u_{i,l}) \quad (3.1)$$

$$\frac{d}{dt}u_{i,g} = -\frac{\kappa}{\tau_p} (u_{i,g} - u_{i,l}) \quad (3.2)$$

où  $\tau_p$  est le temps de relaxation de la particule défini dans la section 2.1.2 et  $\kappa$  le rapport  $\frac{\alpha_l \rho_l}{\alpha_g \rho_g}$ .

Analytiquement, la solution du problème est immédiate dès lors que l'on retranche Eq. (3.2) à Eq. (3.1). Effectivement, on obtient alors une équation différentielle linéaire (Eq. (3.3)) portant sur la vitesse relative  $\tilde{u}_i = (u_{i,g} - u_{i,l})$ .

$$\frac{d}{dt} \tilde{u}_i = -\frac{1 + \kappa}{\tau_p} \tilde{u}_i \quad (3.3)$$

La solution est évidente et permet d'exprimer indépendamment les vitesses gazeuse et liquide en fonction des conditions initiales :

$$u_{i,l}(t) = u_{i,l}(0) + \frac{1}{1 + \kappa} (u_{i,g}(0) - u_{i,l}(0)) \left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} t}\right) \quad (3.4)$$

$$u_{i,g}(t) = u_{i,g}(0) - \frac{\kappa}{1 + \kappa} (u_{i,g}(0) - u_{i,l}(0)) \left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} t}\right) \quad (3.5)$$

## Résolution numérique

La résolution numérique de ce problème est plus complexe. Lorsque le pas de temps numérique est très grand devant le temps de relaxation des particules (i.e.  $\aleph = \frac{\tau_p}{\Delta t} \ll 1$ ), les gouttes se comportent presque instantanément comme des traceurs. Le terme source de traînée contrôlé par le rapport  $\aleph$  peut donc devenir très grand et induire une instabilité numérique. L'une des solutions pour remédier au problème sans modifier le pas de temps consiste à effectuer une intégration locale exacte du système d'équations en utilisant les solutions analytiques données par Eqs. (3.4) et (3.5).

La démarche est présentée ci-dessous pour un schéma temporel du premier ordre. L'Annexe A la développe pour un schéma de Runge Kutta d'ordre 3, utilisé dans le code AVBP\_TPF.

## Intégration temporelle locale exacte pour un schéma d'ordre 1

On utilise la solution analytique du problème temporel (Eqs. (3.4) et (3.5)) pour exprimer les deux quantités suivantes :

$$\frac{u_{i,l}(t + \delta t) - u_{i,l}(t)}{\delta t} = (u_{i,g}(t) - u_{i,l}(t)) \frac{1}{1 + \kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} \quad (3.6)$$

$$\frac{u_{i,g}(t + \delta t) - u_{i,g}(t)}{\delta t} = (u_{i,l}(t) - u_{i,g}(t)) \frac{\kappa}{1 + \kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} \quad (3.7)$$

La même quantité peut être définie pour la vitesse relative  $\tilde{u}_i$  en retranchant Eq. (3.7) à Eq. (3.6) :

$$\frac{\tilde{u}_i(t + \delta t) - \tilde{u}_i(t)}{\delta t} = -\tilde{u}_i(t) \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} = -\tilde{u}_i(0) \frac{1}{1 + \kappa} e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} t} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} \quad (3.8)$$

Ainsi, les équations Eqs. (3.6), (3.7) et (3.8) constituent les formes discrètes des équations Eqs. (3.1), (3.2) et (3.3), dans lesquelles  $\frac{1}{\tau_p}$  a été remplacé par  $\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{1+\kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t}$ .

Deux cas limites se présentent alors :

–  $\frac{\delta t}{\tau_p} \rightarrow 0$  : On démontre la consistance de la discrétisation en vérifiant que :

$$\frac{1}{1+\kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} = \frac{1}{\tau_p} \text{ lorsque } \delta t \rightarrow 0, \quad (3.9)$$

–  $\frac{\delta t}{\tau_p} \rightarrow \infty$  : On montre que :

$$\lim_{\frac{\delta t}{\tau_p} \rightarrow \infty} \frac{1}{1+\kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} = \frac{1}{1+\kappa} \frac{1}{\delta t} \quad (3.10)$$

Cette discrétisation induit donc une limitation du terme source par le pas de temps CFL et le rapport  $\kappa$ . Elle permet d'éviter les instabilités dans le cas limite où le temps de relaxation devient très petit devant le pas de temps d'intégration.

**L'objectif est donc d'intégrer cette correction temporelle dans le code et de tester sa validité dans des cas limites pour lesquels soit  $\aleph \gg 1$ , soit  $\aleph < 1$ .**

### 3.2.2 Géométrie et condition initiale

Le domaine 1D de longueur 10 cm dont le maillage est composé de 100 points régulièrement espacés est initialement rempli de gaz et de gouttes uniformément distribuées dans l'espace. Tous les champs gazeux et liquides sont constants de manière à étudier un problème 0D temporel. Leurs valeurs sont résumées dans le Tab. 3.1.

Champs	P	$T_g$	$U_g$	$T_l$	$U_l$	$\alpha_l$	d
CI	101325	300	0	300	200	$1.047 \cdot 10^{-6}$	$50 \cdot 10^{-6}$

TAB. 3.1 – Cas test traînée 0D - Conditions initiales (unités SI)

### 3.2.3 Conditions aux limites

L'entrée et la sortie sont définies comme des conditions aux limites périodiques.

### 3.2.4 Analyse des résultats

Les résultats présentés ci-dessous se placent dans les deux cas limites précédemment définis. Les propriétés des gouttes sont les suivantes :  $\alpha_l = 1.047 \cdot 10^{-4}$  et  $\tau_p = 5.35 \text{ ms}$ . L'influence de la traînée sur une telle configuration initiale ( $u_g = 0 \text{ m/s}$  et  $u_l = 200 \text{ m/s}$ ) est bien connue. On s'attend à une accélération du gaz et une décélération du liquide de manière à ce qu'ils atteignent la même vitesse finale.

$\aleph \gg 1$

Dans ce cas, le temps de relaxation des gouttes est moindre comparé au pas de temps numérique :  $\Delta t = 1.98\mu s$ , donnant un rapport  $\aleph = 2700$ . Les courbes présentées sur la Fig. 3.1 confirment plusieurs points :

- La traînée est à l’origine du transfert de la quantité de mouvement entre les deux phases et permet aux deux phases d’atteindre le même état final. Les gouttes perdent ainsi près de 95% de leur vitesse initiale.
- La solution numérique est en parfait accord avec la théorie. Les deux courbes se superposent et le point d’intersection des courbes numérique et asymptotique a pour abscisse  $t = \tau_p$ .

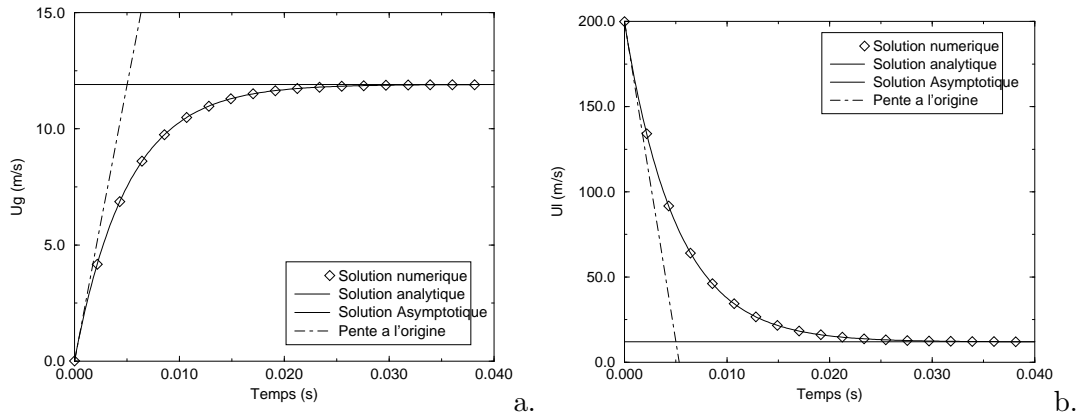


FIG. 3.1 – Cas test traînée 0D -  $\aleph \gg 1$  - a. Vitesse gazeuse - b. Vitesse liquide.

$\aleph < 1$

A présent, le pas d’intégration est supérieur au temps de relaxation :  $\Delta t = 19.8ms$  et  $\aleph = 0.27$ . Fig. 3.2 présente l’évolution temporelle des vitesses au bout de 30 itérations, soit 0,15 s. La correction temporelle introduite permet d’éviter les instabilités et les courbes numérique et analytique se superposent une fois encore. On note que la pente à l’origine est bien plus raide, confirmant ainsi le rôle de traceurs des gouttes.

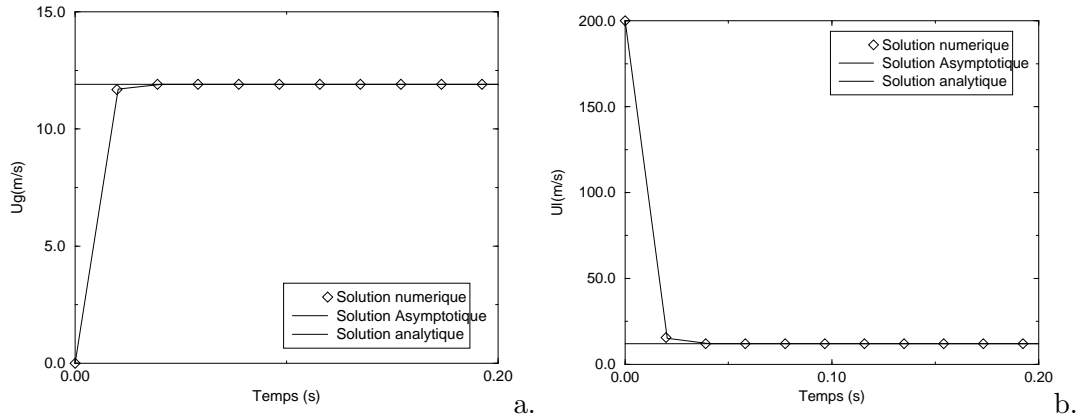


FIG. 3.2 – Cas test traînée 0D -  $\aleph < 1$  - a. Vitesse gazeuse - b. Vitesse liquide.



### 3.3 Validation de la traînée dans un canal monodimensionnel laminaire en régime permanent

#### 3.3.1 Mise en évidence du problème

L'étude d'un problème monodimensionnel permanent, sous les hypothèses d'étude précisées dans le chapitre 2 conduit à la résolution du système simplifié ci-dessous :

$$\frac{d}{dx}(\alpha_l \rho_l u_l) = 0 \quad (3.11)$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_l \rho_l u_l^2) = -F_d \quad (3.12)$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_l \rho_l u_l H_l) = 0 \quad (3.13)$$

$$\frac{d}{dx}(n u_l) = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_g \rho_g u_g) = 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_g \rho_g u_g^2) + \frac{d}{dx} P_g = F_d \quad (3.16)$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_g u_g (\rho_g E_g + P_g)) = -u_g \frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} (u_g - u_l) \quad (3.17)$$

où  $P_g$  suit la loi d'état du gaz parfait :  $P_g = \rho_g r T_g$

Ce système non linéaire n'admet pas de solution analytique exacte. Pourtant, pour valider le modèle de traînée dans cette configuration, il est nécessaire d'avoir une solution de référence du problème. On pourra en outre utiliser cette solution pour initialiser le problème afin de s'affranchir de l'influence non négligeable des conditions initiales sur les résultats.

Afin de suivre cette démarche, deux hypothèses vont nous être nécessaires :

- Si les vitesses des deux phases sont très différentes à l'entrée du domaine, elles le restent sur toute la longueur :

$$u_{l_o} \gg u_{g_o} \Rightarrow \forall x \in [0; L], u_l(x) \gg u_g(x) \quad (3.18)$$

où l'indice  $o$  désigne la valeur à l'entrée du domaine.

- Le canal est suffisamment court pour qu'un **développement limité au 1<sup>er</sup> ordre de la vitesse gazeuse** constitue une bonne approximation de la solution. La validité de cette hypothèse sera démontrée au cours des calculs.

Ces deux hypothèses vont nous permettre de débusquer une solution approchée du problème. Nous allons donc caractériser l'évolution spatiale des grandeurs caractéristiques de l'écoulement diphasique.

### Solution analytique approchée pour la phase liquide

Soit  $\dot{m}_l$  le débit massique de liquide. Eq. (3.11) nous indique que :  $\dot{m}_l = \dot{m}_{lo}$ . En réinjectant ce résultat dans Eq. (3.12), on obtient :

$$\dot{m}_{lo} \frac{d}{dx} u_l = -F_d = \frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( \frac{u_g}{u_l} - 1 \right) \quad (3.19)$$

L'hypothèse  $u_l \gg u_g$  permet de simplifier Eq. (3.19) :

$$\frac{d}{dx} u_l = -\frac{1}{\tau_p} \quad (3.20)$$

La solution de Eq. (3.20) est immédiate :

$$u_l(x) = u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \quad (3.21)$$

On reviendra sur cette solution approchée ainsi que sur l'évolution des autres variables liquides une fois la vitesse gazeuse calculée.

### Solution analytique approchée pour la phase gazeuse

De même que pour la phase liquide, Eq. (3.15) démontre une conservation du débit massique pour la phase gazeuse :  $\dot{m}_g = \alpha_g \rho_g u_g = \dot{m}_{go}$

On utilise ce résultat dans Eq. (3.16) et on obtient :

$$\frac{d}{dx} (\dot{m}_{go} u_g + P_g) = F_d = -\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( \frac{u_g}{u_l} - 1 \right) \quad (3.22)$$

La forme intégrée entre l'entrée et le point d'abscisse  $x$  de Eq. (3.22) s'écrit ainsi :

$$\dot{m}_{go}(u_g(x) - u_{go}) + P_g(x) - P_{go} = -\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \int_o^x \left( \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 \right) dz \quad (3.23)$$

### *Caractère isentropique de l'écoulement gazeux*

Dans l'Annexe B, on montre qu'un écoulement gazeux régi par de telles équations est isentropique. On a donc la relation de Laplace :  $p_g u_g^\gamma = p_{go} u_{go}^\gamma$ .

Eq. (3.23) peut donc s'exprimer uniquement en fonction des vitesses gazeuse et liquide :

$$\dot{m}_{go}(u_g(x) - u_{go}) + P_{go} \left( \left[ \frac{u_{go}}{u_g(x)} \right]^\gamma - 1 \right) = -\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \int_o^x \left( \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 \right) dz \quad (3.24)$$

### *Expression de la vitesse du gaz*

On cherche une solution de  $u_g$  sous forme d'un polynôme du second ordre, avec l'idée que notre domaine sera court. Ainsi, la vitesse du gaz restera petite comparée à celle du liquide.

On pose donc :  $u_g(x) = u_{go} + Ax + Bx^2$

Le but est d'effectuer un développement au second ordre de Eq. (3.24) afin de déterminer par la méthode d'identification des coefficients les inconnues  $A$  et  $B$ .

On utilise tout d'abord le caractère isentropique de l'écoulement pour exprimer la pression  $P_g$  en fonction des deux inconnues :

$$\begin{aligned}
P_g(x) &= P_{go} \left( \frac{u_{go}}{u_g(x)} \right)^\gamma \\
P_g(x) &= P_{go} \left( 1 + \frac{A}{u_{go}}x + \frac{B}{u_{go}} \frac{x^2}{2} \right)^\gamma \\
P_g(x) &= P_{go} \left( 1 - \frac{\gamma A}{u_{go}}x + \gamma x^2 \left[ \frac{(\gamma+1)A^2}{2u_{go}^2} - \frac{B}{u_{go}} \right] \right) \tag{3.25}
\end{aligned}$$

On peut donc exprimer le membre de gauche de Eq. 3.24 en fonction des coefficients  $A$  et  $B$  :

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{go}(u_g(x) - u_{go}) + P_{go} \left( \left[ \frac{u_{go}}{u_g(x)} \right]^\gamma - 1 \right) = \\
\dot{m}_{go}(Ax + Bx^2) + P_{go} \left( -\frac{\gamma A}{u_{go}}x + \gamma x^2 \left[ \frac{(\gamma+1)A^2}{2u_{go}^2} - \frac{B}{u_{go}} \right] \right) \tag{3.26}
\end{aligned}$$

Pour le membre de droite de Eq. 3.24, on opère de la même manière. On développe le terme  $\frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1$  à l'ordre 1 puis on intègre :

$$\begin{aligned}
\frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 &= \frac{u_{go} + Az + Bz^2}{u_{lo} - \frac{z}{\tau_p}} - 1 \\
\frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 &= \frac{u_{go}}{u_{lo}} \left( 1 + \frac{A}{u_{go}}z + \frac{z}{u_{lo}\tau_p} \right) - 1 \tag{3.27}
\end{aligned}$$

Ainsi, le membre de droite s'écrit :

$$-\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \int_0^x \left( \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 \right) dz = -\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( \left[ \frac{u_{go}}{u_{lo}} - 1 \right] x + \left[ \frac{A}{u_{go}} + \frac{1}{u_{lo}\tau_p} \right] \frac{u_{go}}{u_{lo}} \frac{x^2}{2} \right) \tag{3.28}$$

Pour finir, on utilise la méthode d'identification des coefficients pour pouvoir exprimer la vitesse du gaz. On obtient :

$$u_g(x) = u_{go} + Ax + Bx^2 \tag{3.29}$$

$$\begin{aligned}
\text{avec } A &= \frac{\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( 1 - \frac{u_{go}}{u_{lo}} \right)}{\dot{m}_{go} - \frac{P_{go}\gamma}{u_{go}}} \\
\text{et } B &= \frac{-\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( \frac{A}{u_{go}} + \frac{1}{u_{lo}\tau_p} \right) \frac{u_{go}}{2u_{lo}} - \frac{P_{go}\gamma(\gamma+1)A^2}{2u_{go}^2}}{\dot{m}_{go} - \frac{P_{go}\gamma}{u_{go}}}
\end{aligned}$$

On peut donc à présent conclure quant à l'hypothèse de linéarité de la vitesse du gaz : celle-ci est vraie à condition que :  $BL^2 \ll AL$  ou encore  $L \ll \frac{A}{B}$ . Cette condition sera vérifiée dans notre cas test.

### ***Expression des autres variables gazeuses***

L'expression de  $u_g$  étant démontrée, les équations de Navier-Stokes nous permettent de déterminer l'évolution spatiale au 1<sup>er</sup> ordre des autres grandeurs caractéristiques du gaz.

L'hypothèse de milieu dilué permet d'affirmer :  $\alpha_g(x) \sim 1$ . De ce fait, Eq. (3.15) renseigne directement l'évolution spatiale de la masse volumique du gaz :

$$\rho_g(x) = \frac{\rho_{go}u_{go}}{u_g(x)} = \rho_{go} \left(1 - \frac{A}{u_{go}}x\right) \quad (3.30)$$

Puis, Eq. (3.25) nous donne directement la pression :

$$P_g(x) = P_{go} \left(1 - \frac{\gamma A}{u_{go}}x\right) \quad (3.31)$$

Enfin, l'équation d'état du gaz permet de déduire la température :

$$T_g(x) = \frac{P(x)}{\rho(x)r} = T_{go} \left(1 - \frac{A}{u_{go}}x(\gamma - 1)\right) \quad (3.32)$$

### **Retour sur la phase liquide**

L'expression de la vitesse gazeuse permet d'affiner celle de la vitesse des gouttes. On réinjecte l'expression de  $u_g$  dans la force de traînée :

$$F_d = -\frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} (u_g - u_l) = -\frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} \left[ u_{go} + Ax - \left( u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \right) \right] \quad (3.33)$$

On utilise alors cette dernière formulation de la traînée dans Eq. (3.12) afin d'obtenir une meilleure approximation de la vitesse de la phase dispersée :

$$u_l^2(x) = \left( u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \right)^2 + \frac{x}{\tau_p} (2u_{go} + Ax) \quad (3.34)$$

Il est alors aisé de déterminer l'évolution spatiale de la fraction volumique liquide et du nombre de gouttes par unité de volume en intégrant Eqs. (3.11) et (3.14) :

$$\alpha_l(x) = \frac{\alpha_{lo}u_{lo}}{\sqrt{\left( u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \right)^2 + \frac{x}{\tau_p} (2u_{go} + Ax)}} \quad (3.35)$$

$$n(x) = \frac{n_o u_{lo}}{\sqrt{\left( u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \right)^2 + \frac{x}{\tau_p} (2u_{go} + Ax)}} \quad (3.36)$$

**Pour ce cas test, l'ensemble des champs gazeux et liquides est initialisé avec cette solution analytique approchée. On comparera ensuite les résultats fournis par le code avec cette même solution.**

### 3.3.2 Géométrie et conditions aux limites

Le domaine 1D a été choisi de longueur  $L = 5 \text{ cm}$  afin de se placer dans la première hypothèse de calcul de la solution analytique. En effet, les conditions imposées à l'entrée (cf. Tab. 3.2) induisent :  $\frac{B}{A} = 0.23$ . Ainsi, la longueur choisie vérifie :  $\frac{LB}{A} = 1\%$ . Elle compte en outre 100 points régulièrement espacés. A l'entrée, les vitesses et températures liquides et gazeuses ainsi que la fraction volumique de liquide sont imposées par le biais de conditions aux limites aux caractéristiques [11]. A la sortie, on fixe la pression afin de retrouver une pression atmosphérique à l'entrée, soit  $P_L = 1,075 \text{ Pa}$ . Tab. 3.2 résume les valeurs du champ diphasique à l'entrée.

Champs	$P_o$	$T_{go}$	$U_{go}$	$T_{lo}$	$U_{lo}$	$\alpha_{lo}$	$n_{lo}$	d
CL entrée	101325	300	10	300	100	$1.047 \cdot 10^{-2}$	$1.610^{11}$	$50 \cdot 10^{-6}$

TAB. 3.2 – Cas test traînée 1D - Conditions aux limites (unités SI)

### 3.3.3 Conditions initiales

Les conditions aux limites à l'entrée permettent de déterminer l'évolution spatiale initiale des variables diphasiques. Le paramètre essentiel est le coefficient  $A$  de la vitesse gazeuse. Les conditions imposées à l'entrée entraînent et  $A = -8.77$ . Dans la section suivante, Fig. 3.3 donne les profils initiaux en traits pleins.

### 3.3.4 Analyse des résultats

La figure 3.3 présente les résultats fournis par AVBP\_TPF (traits pleins marqués de losanges) comparés à la solution analytique approchée (traits pleins). On note avant tout un très bon accord entre les prévisions analytiques et les résultats numériques, et ce bien que la solution de référence ne soit qu'approchée.

Numériquement, deux points sont à souligner :

- La phase liquide est particulièrement bien prédite par le code. De ce fait, la fraction volumique de liquide et donc le nombre de gouttes (non représenté mais proportionnel à la fraction volumique de liquide) concordent parfaitement avec la solution analytique. On note cependant qu'il s'est avéré utile d'ajouter sur la phase liquide un faible niveau de viscosité artificielle afin de pallier la légère instabilité dont elle est à l'origine (cf. Section 3.4).
- De légères différences apparaissent sur les courbes de la phase gazeuse. D'une part, si les pentes de la masse volumique et de la pression concordent avec la solution de référence, les niveaux à l'entrée diffèrent légèrement de ceux imposés. Cette erreur tient certainement à la manière dont on tient la pression à la sortie : il faudrait l'imposer encore plus fermement. En effet, l'utilisation de conditions aux limites du type NSCBC induit la résolution de l'équation (3.37) dans laquelle  $K$  est le coefficient de relaxation,  $G$  la grandeur calculée et  $G_t$  la valeur cible.

$$\frac{d}{dt}G = K(G - G_t) \quad (3.37)$$

Ainsi, plus  $K$  est grand, plus le ressort est raide et la pression est tenue. Ce travail n'a pas été réalisé mais il ne consiste qu'à modifier la tension du ressort maintenant la pression à la sortie.

D'autre part, l'inexactitude de la solution de référence semble être à l'origine des variations sur la vitesse et la température.

Physiquement, il paraît important de noter que sur un domaine aussi court, contrairement à nos attentes, la décélération du liquide s'accompagne d'une décélération du gaz. Il semble donc que dans ces conditions particulières, la pression ait une incidence plus forte sur le gaz que la traînée.

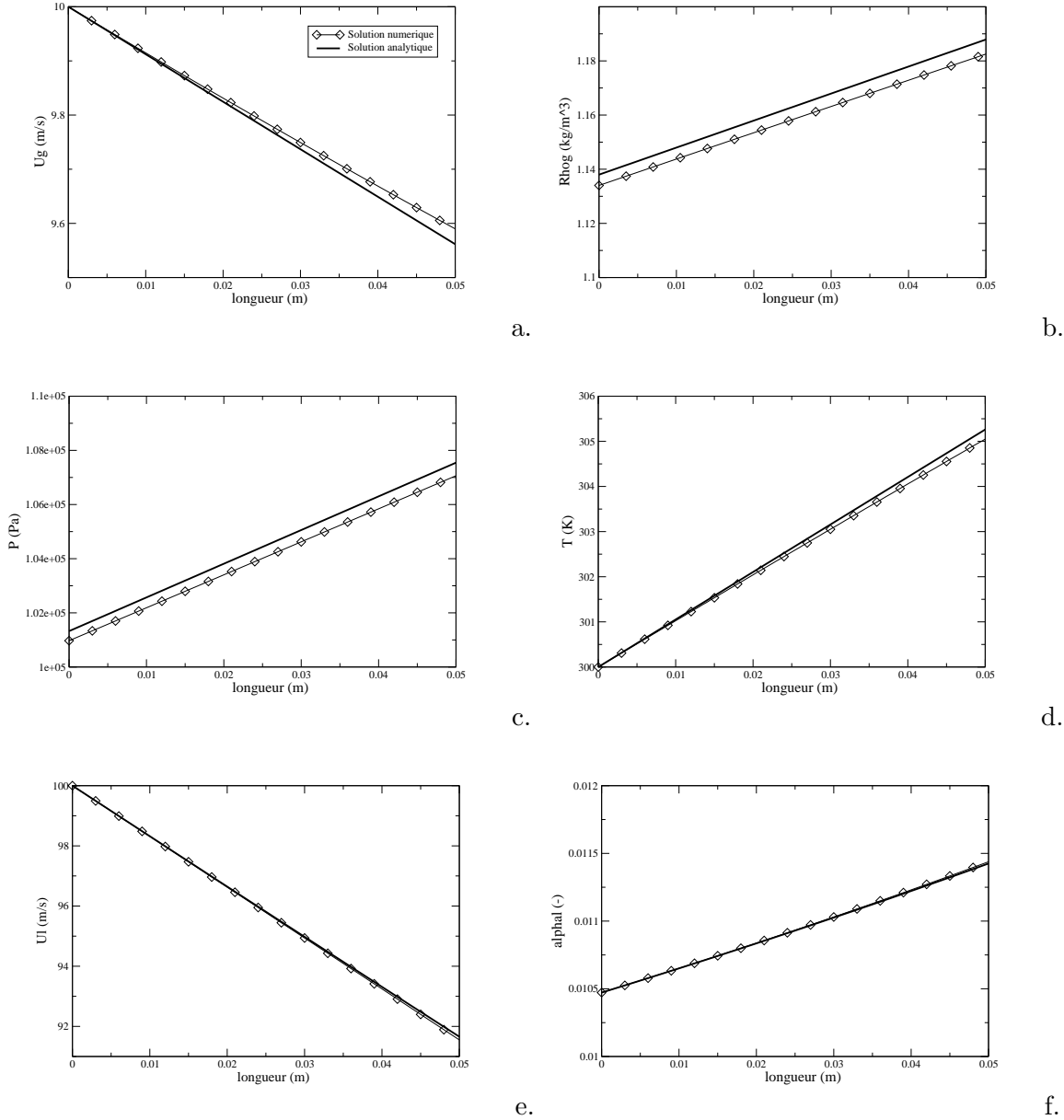


FIG. 3.3 – Cas test traînée 1D - Résultats globaux - a. Vitesse gazeuse- b. Masse volumique gazeuse - c. Pression - d. Température gazeuse - e. Vitesse liquide - b. Fraction volumique liquide.

### 3.4 Résolution numérique de l'équation de Burgers

Le troisième et dernier point de cette étape de validation consiste en la résolution numérique de l'équation “ non visqueuse de Burgers ”, qui est l'équation de la vitesse du liquide sans terme source et est rappelée ci-dessous :

$$\frac{\partial}{\partial t} u_l(x, t) + u_l(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u_l(x, t) = 0 \quad (3.38)$$

Bien qu'elle constitue le plus simple modèle d'une physique incluant des termes non linéaires, cette équation a fait l'objet de nombreuses études. En termes d'équation d'ondes, R.J. LeVeque [9] a montré que les caractéristiques restent parallèles loin de la perturbation et qu'elles s'inclinent au niveau de celle-ci. Pour des temps grands, ces caractéristiques se coupent, la pente de la fonction  $u_l(x, t)$  est infinie, ce qui crée un choc (cf. Fig. 3.4). L'une des solutions consiste à rajouter un terme visqueux  $\epsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2}$  très petit dans Eq. (3.38) afin de diminuer les gradients de vitesse à l'origine du choc.

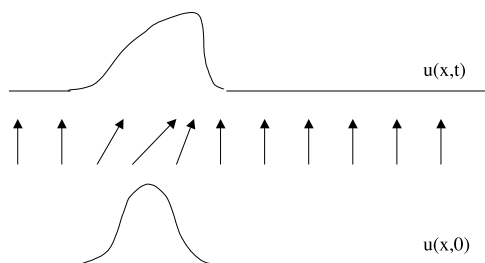


FIG. 3.4 – Cas test Burgers - Croquis de formation d'un choc

#### 3.4.1 Description du cas test

##### Géométrie

Le domaine 1D de longueur 5 cm présente des conditions aux limites périodiques. Afin de tester l'influence du nombre de points dans la perturbation, on teste 3 maillages plus ou moins raffinés dont les caractéristiques sont réunies dans Tab. 3.3.

	MESH 1	MESH 2	MESH 3
<b>Nombre de cellules</b>	100	200	1000
$x_{min} = \Delta x$	$5 \cdot 10^{-4}$ m	$5 \cdot 10^{-4}$ m	$5 \cdot 10^{-5}$
<b>Nombre de points dans la perturbation</b>	30	60	300

TAB. 3.3 – Cas test Burgers - Caractéristiques des maillages

##### Configuration initiale

La figure 3.5 résume les conditions initiales du cas test. Les champs gazeux sont constants tandis que l'on introduit des perturbations gaussiennes sur les champs liquides  $u_l$ ,  $\alpha_l$  et  $n_l$  de la forme :

$$- u_l = u_{l0} \left( 1 + A e^{-\frac{(x-x_o)^2}{\sigma^2}} \right) \text{ avec } u_{l0} = 10 \text{ m.s}^{-1}, A = 1, x_o = 0.025 \text{ m}, \sigma^2 = 0.00002$$

- la perturbation sur  $n_l$  est du même type avec  $n_o = 1.6 \cdot 10^8$
- la relation  $\alpha_l = n \frac{\Pi d^3}{6}$  permet de calculer  $\alpha_l$

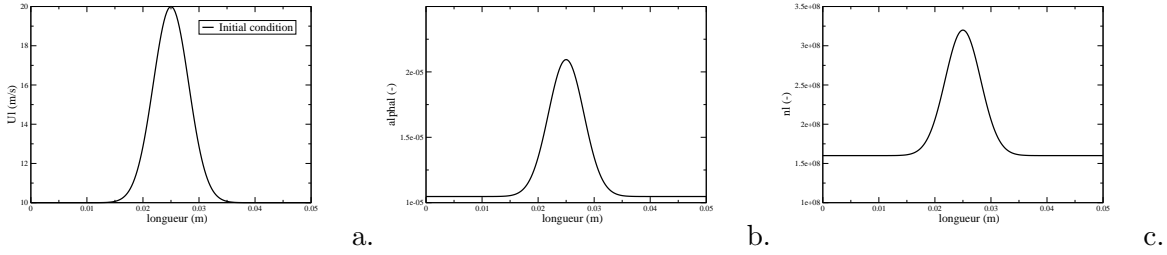


FIG. 3.5 – Cas test Burgers - Configuration initiale - a. Vitesse liquide - b. Fraction volumique de liquide - c. Nombre de gouttes

L'objectif de cette partie est de caractériser le comportement du code lors de la résolution numérique de Eq. (3.38). Le temps global de calcul correspond à un temps convectif. On recherche le niveau minimal de viscosité artificielle et le nombre de points nécessaires dans le choc pour le transporter.

### 3.4.2 Analyse des résultats

#### Niveau minimal de viscosité artificielle

Le but de la viscosité artificielle dans cette configuration est de diminuer les gradients trop forts à l'origine du choc puis de l'explosion du calcul. Cependant, il est indispensable de déceler le niveau minimal nécessaire. Effectivement, un niveau trop élevé de viscosité artificielle engendre un amoindrissement des perturbations, ce qui nuit à la compréhension des petites structures de la turbulence par exemple.

Les figures 3.6 et 3.7 présentent les résultats obtenus pour trois niveaux de viscosité et pour les maillages les plus et moins raffinés. Conformément à nos attentes, cet artifice numérique permet de résoudre le problème. Pourtant, pour les deux maillages, on note une diminution significative de l'amplitude de la perturbation (40%). De plus, si pour le maillage raffiné, le choc de vitesse reste très raide, il l'est beaucoup moins pour le maillage le plus large, au point de réduire la perturbation à une simple bosse sans signification.

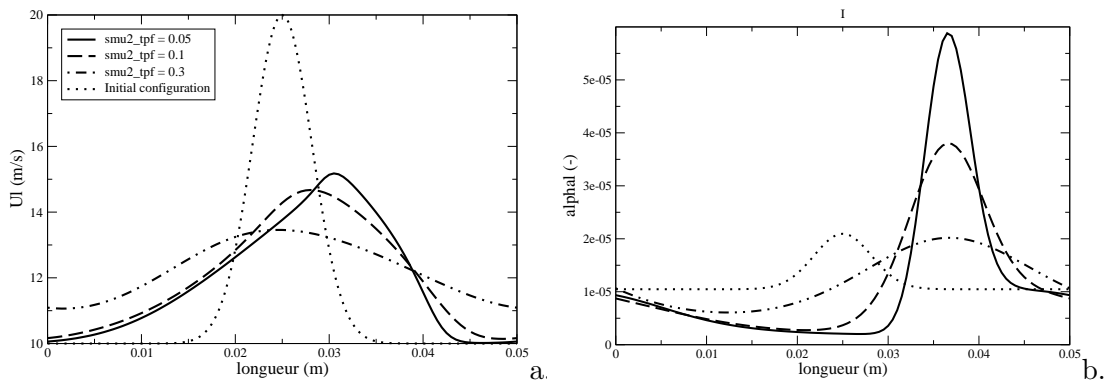


FIG. 3.6 – Cas test Burgers - Rôle de la viscosité artificielle -  $t_3 = 3.97ms$  - a. Vitesse - b. Fraction volumique



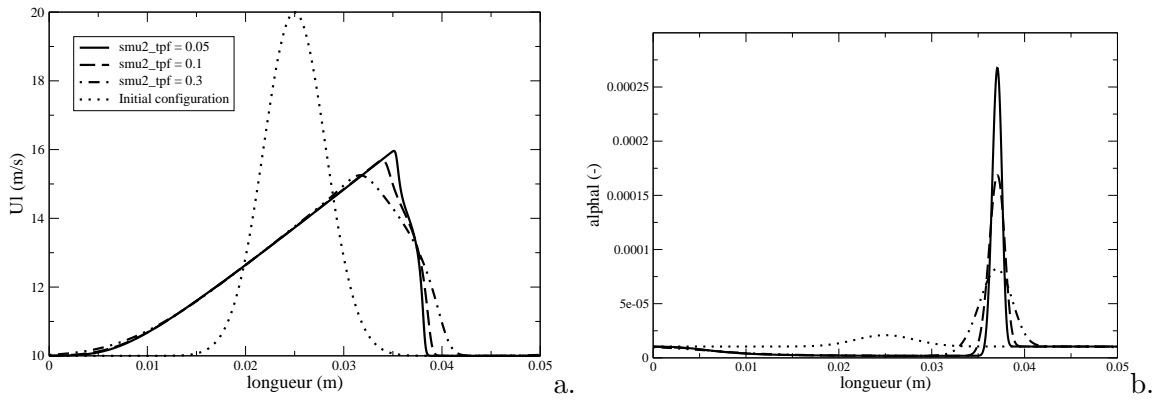


FIG. 3.7 – Cas test Burgers - Rôle de la viscosité artificielle -  $t_3 = 3.97ms$  - a. Vitesse - b. Fraction volumique

### Influence du nombre de points dans le choc

Les figures 3.8 et 3.9 mettent en évidence l'influence du nombre de points dans la gaussienne. Les perturbations ont respectivement parcouru le tiers de la longueur et la longueur du domaine. Trois phénomènes apparaissent :

- la dissipation : l'amplitude de la perturbation diminue au cours du temps.
- la diffusion : le front de vitesse est d'autant plus raide que le maillage est raffiné. On note cependant que 60 points dans le front suffisent à obtenir des résultats exploitables.
- la dispersion : Tab. 3.4 donne les vitesses de propagation des perturbations pour les trois maillages aux temps  $t_1$ ,  $t_2$  et  $t_3$ .

Vitesses de convection ( $m.s^{-1}$ )	MESH 2	MESH 1	MESH 3
$t_1 = 0.99 ms$	16.16	17.17	18.51
$t_2 = 1.98 ms$	14.92	15.66	16.57
$t_3 = 3.97 ms$	13.97	14.45	15.13

TAB. 3.4 – Cas test Burgers - Comparaison des vitesses de convection

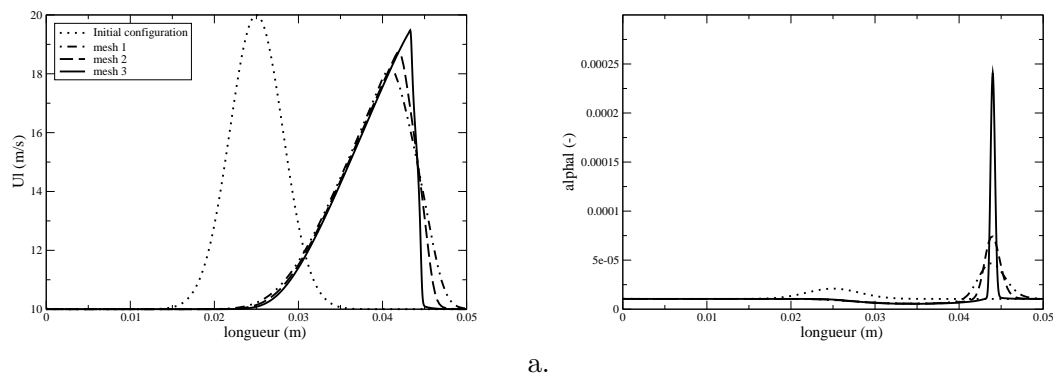
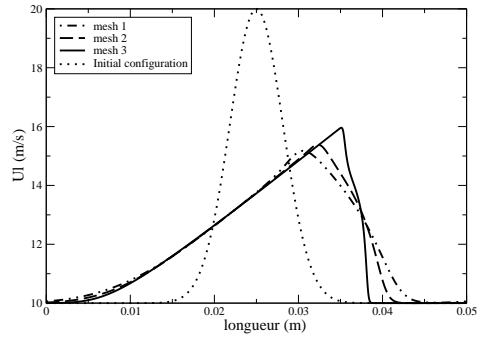
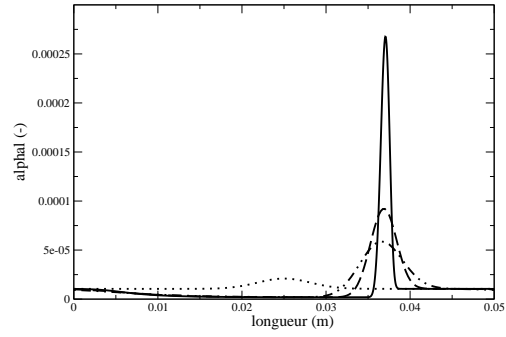


FIG. 3.8 – Cas test Burgers - Influence du maillage -  $t_1 = 0.99ms$  - a. Vitesse - b. Fraction volumique



a.



b.

FIG. 3.9 – Cas test Burgers - Influence du maillage -  $t_3 = 3.97ms$  - a. Vitesse - b. Fraction volumique

### 3.5 Conclusion

Au vu des précédents résultats, il apparaît que le code est en mesure d'effectuer des calculs spatio-temporels diphasiques avec couplage des deux phases par la traînée. Tous les outils nécessaires aux calculs de jets diphasiques sont à présent disponibles.

## Chapitre 4

# Jet diphasique bidimensionnel turbulent

### 4.1 Présentation du problème

Aujourd'hui, le modèle eulérien implanté dans AVBP\_TPF ne modélise pas à proprement parlé l'injecteur diphasique. En effet, on ne modélise pas encore les distributions de gouttes ni le phénomène d'atomisation. Ainsi, afin de calculer le jet diphasique issu de l'injecteur, on utilise les profils de vitesse obtenus expérimentalement en sortie de l'injecteur pour imposer nos conditions aux limites à l'entrée.

La sortie de l'injecteur étudié présente un diamètre de 2 cm et nous avons décidé d'étudier le jet sur une longueur de 40 cm. Le domaine de calcul est de forme rectangulaire et de dimensions 0.4 m x 0.15 m. Le choix du maillage sera discuté dans la section 4.2.

Après un calcul laminaire ( $Re_g = 110$ ) de vérification, les calculs turbulents ( $Re_g = 11000$ ) seront menés pour différents nombres de Stokes. Ils permettront de mettre en évidence d'une part le rôle plus ou moins traceur des gouttes et d'autre part la formation de paquets de gouttes. A cette occasion, on quantifiera le phénomène de ségrégation.

Tous les calculs ont été réalisés en couplage direct (seul le gaz influence le liquide) puis en couplage direct-inverse. Dans un souci de concision, seul le couplage direct-inverse est présenté ci-dessous.

### 4.2 Choix du maillage

La figure 4.1 présente le maillage utilisé pour l'ensemble des calculs. A l'entrée, 14 points régulièrement espacés décrivent la sortie d'injecteur. Des deux cotés du jet, le maillage est d'autant plus large que l'on se rapproche des bords. La hauteur du domaine compte 44 points. La longueur du domaine de calcul (0.4 m) comporte 100 points régulièrement espacés. Les 20 derniers centimètres s'apparentent aux "silencieux" placés en aval des chambres de combustion. Leur fonction est de dissiper numériquement les structures tourbillonnaires afin qu'elles ne perturbent pas la sortie. Par conséquent, le maillage est déraffiné à cet endroit de manière à ce que la dernière maille soit 10 fois plus longue que la première. Le maillage compte près de 4700 cellules. On note qu'une étude de maillage a été réalisée afin de s'assurer que les résultats en soient indépendants. Le "silencieux" a fait l'objet d'une étude fine :

- Sa présence est indispensable car elle permet de stabiliser le calcul en cassant les grosses structures turbulentes en sortie du domaine.
- Un silencieux convergent incite les tourbillons à sortir plus rapidement du domaine et élimine les vitesses négatives en sortie. Cependant, d'autres se heurtent à la paroi oblique, créant des ondes acoustiques dans le domaine.
- Sa position n'influence pas la turbulence de l'écoulement : quelle que soit la place du silencieux, les phénomènes turbulents sont observés sur les 40 premiers centimètres du domaine.

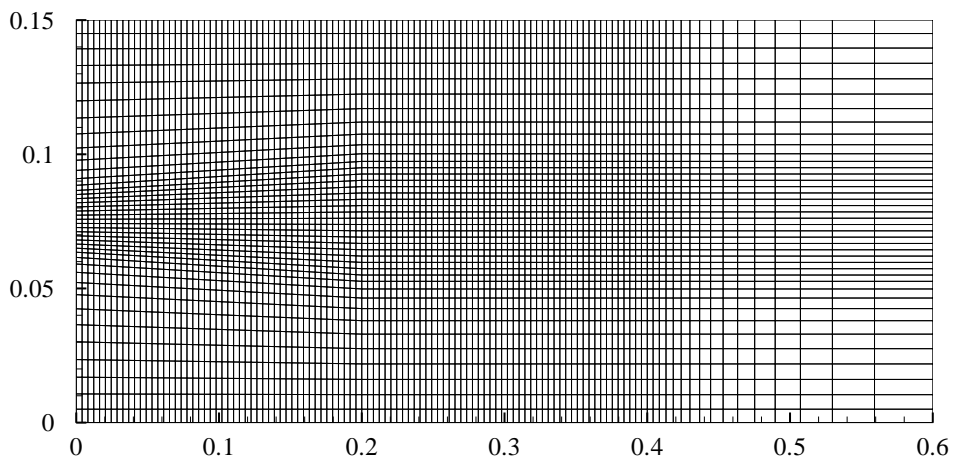


FIG. 4.1 – Jet diphasique - Maillage

### 4.3 Conditions initiales et aux limites.

#### Conditions initiales

Les vitesses des deux fluides, ainsi que la fraction volumique de liquide et le nombre de gouttes sont initialisés avec une gaussienne centrée sur le jet de la forme :

$$\forall x, A(y) = A_o e^{-\frac{(y-y_o)^2}{\sigma^2}} \quad (4.1)$$

avec  $y_o$  la demie hauteur du domaine et  $\sigma = 5.10^{-5} m^2$ .

Les grandeurs  $A_o$  sont données dans Tab. 4.1 ainsi que la valeur de tous les autres champs, initialement constants.

Champs	$P_o$	$U_{go}$	$V_{go}$	$T_{go}$	$U_{lo}$	$V_{lo}$	$T_{lo}$	$\alpha_{lo}$
CI	101325	10	0	300	10	0	300	$1.047.10^{-4}$

TAB. 4.1 – Jet diphasique : Conditions initiales (unités SI)

#### Conditions aux limites

- A l'entrée, on impose pour les vitesses gazeuse et liquide une parabole de la forme :

$$u(y) = u_o \left( 1 - \left[ \frac{(y - y_o)}{y_{jet}} \right]^2 \right) \quad (4.2)$$

- où  $y_{jet}$  est la demie hauteur du jet. En outre, on impose  $u_{go} = u_{lo} = 10 \text{ m.s}^{-1}$
- La sortie est convective pour le liquide tandis que la pression est imposée pour la phase gazeuse.
  - Les murs de part et d'autre du jet sont des murs non glissants.
  - Les parties supérieures et inférieures du domaine sont des murs glissants pour les gouttes et non glissants pour le gaz.

## 4.4 Analyse des résultats

### 4.4.1 Calcul laminaire

Les figures 4.2 et 4.3 présentent les résultats du cas laminaire, conformes à nos attentes. On a pu au cours de cette étude préalable établir le niveau de viscosité artificielle nécessaire pour stabiliser le calcul. Il est d'ailleurs conforme aux niveaux de viscosité utilisés lors des cas tests. L'initialisation des calculs par des profils gaussiens permet de diminuer notablement le temps de convergence de calcul et s'avère être un gage de stabilité. Enfin, ce calcul valide notre choix d'assimiler les parois à des murs.

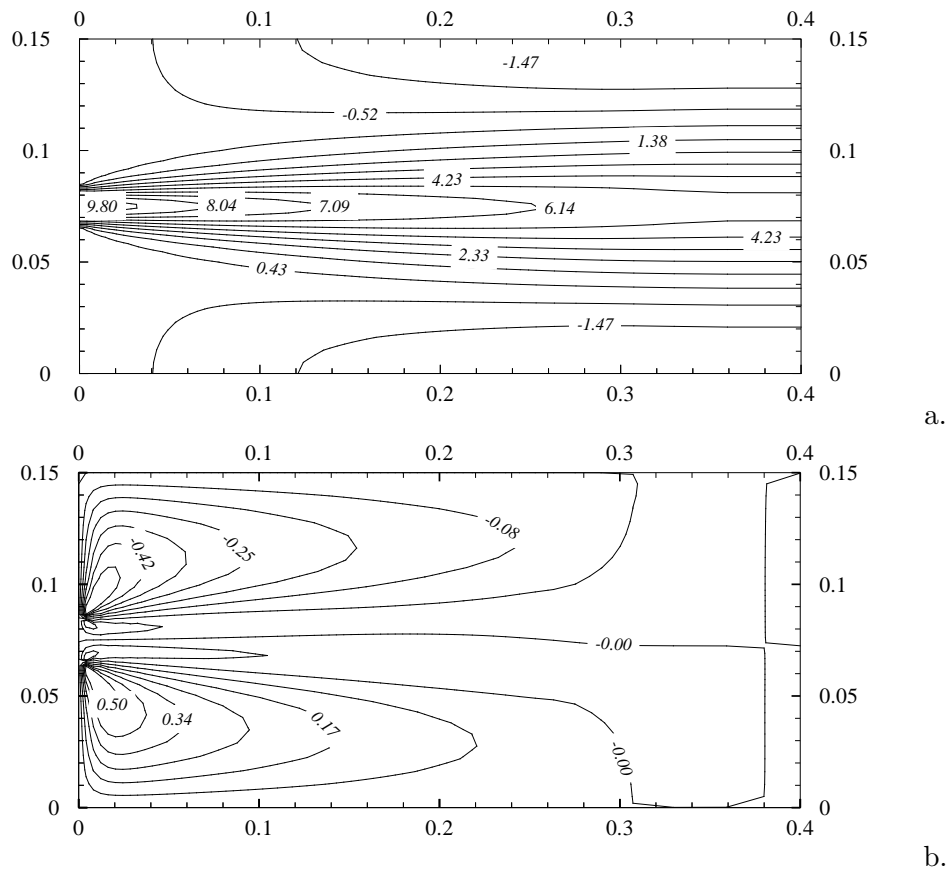


FIG. 4.2 – Jet diphasique - Cas laminaire - Phase gazeuse - a.  $u_g$  - b.  $v_g$

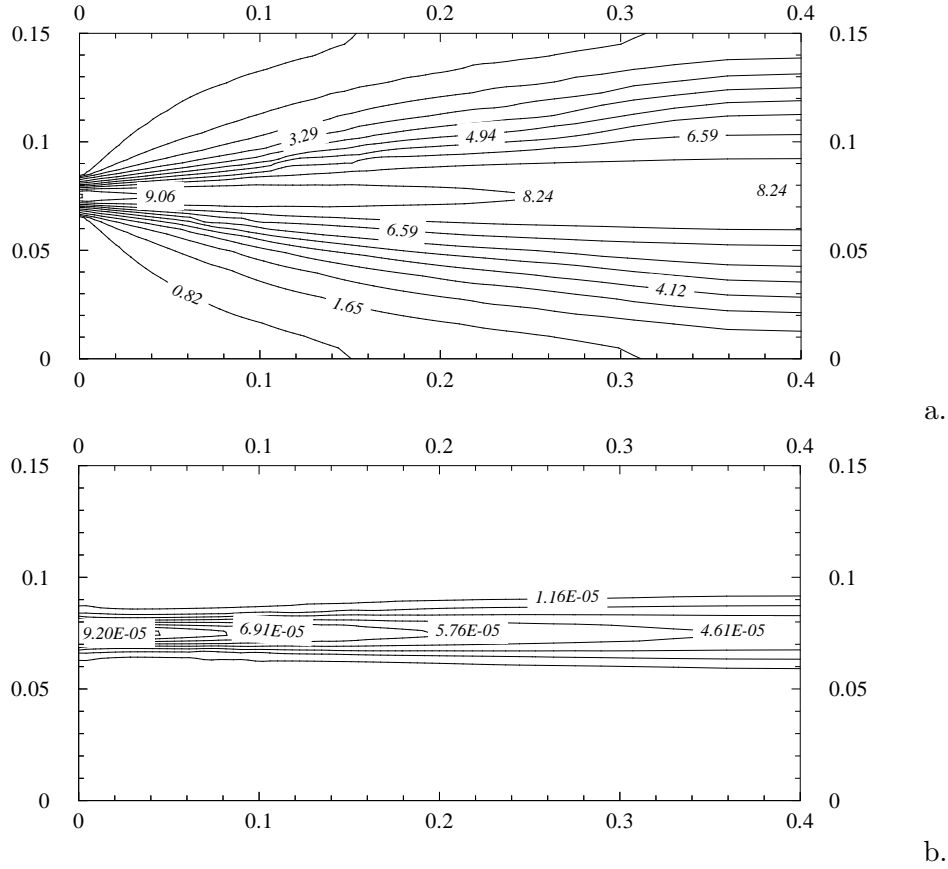


FIG. 4.3 – Jet diphasique - Cas laminaire - Phase liquide - a.  $u_l$  - b.  $\alpha_l$

#### 4.4.2 Calcul turbulent

Le nombre de Stokes, sans dimension, permet de caractériser l'effet de la traînée sur l'écoulement diphasique.

On rappelle sa définition :  $St = \frac{\tau_p}{T_f}$

où  $\tau_p$  est le temps de relaxation des gouttes défini dans la section 2.1.2 et  $T_f$  un temps caractéristique du gaz.

#### Comportement du liquide comparé à l'écoulement gazeux

La comparaison des deux temps caractéristiques  $\tau_p$  et  $T_f$  permet de caractériser le comportement de la phase dispersée. En effet, lorsque  $St \ll 1$ , les gouttes répondent bien à l'écoulement et se comportent comme des scalaires passifs. En revanche, lorsque  $St \gg 1$ , les variations de la phase gazeuse, en l'occurrence les phénomènes turbulents, se produisent à des échelles temporelles plus petites que celles des gouttes et ces dernières ont donc du mal à suivre l'écoulement gazeux.

Dans notre configuration, on définit  $T_f$  comme le temps caractéristique des grosses échelles de la turbulence :  $T_f = \frac{l_t}{v'}$ .  $l_t$  est la taille caractéristique d'un tourbillon et  $v'$  sa vitesse. Ces deux grandeurs varient peu en fonction du nombre de Stokes et Fig. 4.4 nous donne leurs ordres de grandeur :  $l_t = \frac{y_0}{2} = 0.075 \text{ m}$  et  $v' = 6 \text{ m.s}^{-1}$  de sorte que  $T_f = 0.0125 \text{ s}$ .

Ainsi, faire varier  $St$  revient à modifier  $\tau_p$ . Nous avons donc mené les calculs de jets diphasiques turbulents pour 9 nombres de Stokes dans la gamme  $[0.05; 6.8]$ . Pour ce faire, on fait varier le diamètre  $d$  des gouttes dans la gamme  $[17; 180] \mu m$ .

La figure 4.4 illustre le comportement du liquide pour deux nombres de Stokes différents. Lorsque  $St = 0.4$  (colonne de gauche sur Fig. 4.4), les contours de vitesse gazeuse et liquide se superposent, tant si l'on considère leur forme que leur intensité. Les gouttes jouent donc le rôle de traceurs. En revanche, lorsque  $St = 6.8$  (colonne de droite sur Fig. 4.4), les structures des deux écoulements sont totalement différentes. Tandis que l'écoulement gazeux varie peu avec le nombre de Stokes, l'écoulement liquide suit beaucoup moins le gaz à grand nombre de Stokes.

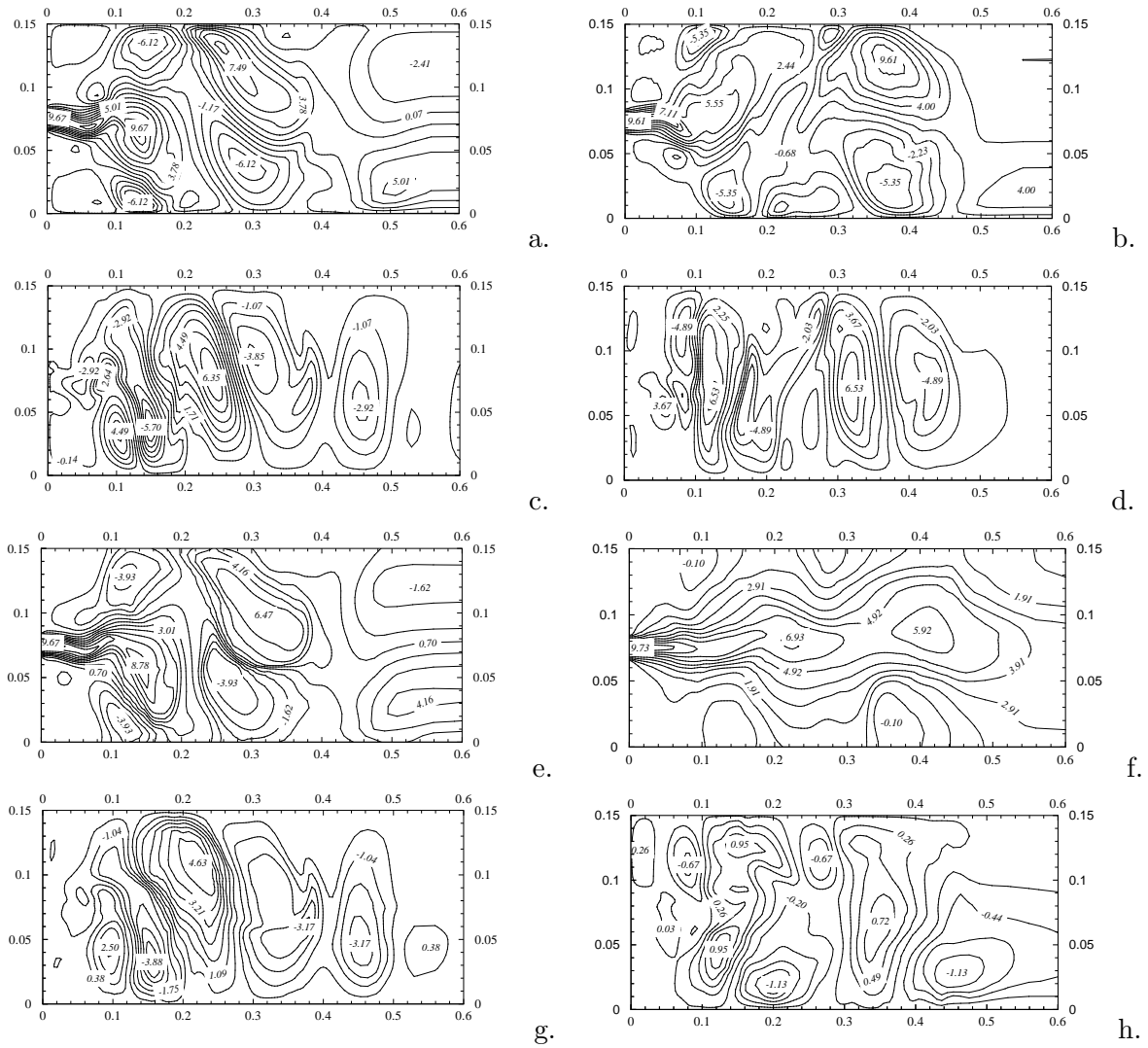


FIG. 4.4 – Jet diphasique - Cas turbulent - Evolution de l'écoulement liquide avec le nombre de Stokes - a.  $u_{g0.4}$  - b.  $u_{g6.8}$  - c.  $v_{g0.4}$  - d.  $v_{g6.8}$  - e.  $u_{l0.4}$  - f.  $u_{l6.8}$  - g.  $v_{l0.4}$  - h.  $v_{l6.8}$

## Quantification de l'effet de ségrégation

La ségrégation est un phénomène de concentration préférentielle des gouttes aux endroits de faible vorticité. Il se produit lorsque les gouttes interagissent avec les structures tourbillonnaires du fluide. P. Février [2] a déjà étudié ce phénomène dans une étude lagrangienne de l'effet de ségrégation de particules en fonction du nombre de Stokes en turbulence homogène isotrope. Son but était de décrire précisément les effets de la turbulence sur la concentration préférentielle des particules afin de répondre aux différentes théories, contradictoires de Squires & Eaton (1991) et Maxey (1987) d'une part et de Crowe (1985) et Chung & Troutt d'autre part. Ainsi, il a mené des calculs SND et SGE afin de caractériser l'influence du nombre de Stokes sur la ségrégation et de déterminer le rôle des différentes échelles de la turbulence dans le processus de concentration préférentielle.

Le caractère homogène et isotrope de ses écoulements lui ont permis de définir le nombre de Stokes pour tout le domaine (car  $T_f$  est constant dans tout le domaine). Dans notre cas, nous définissons un nombre de Stokes "local". En effet, nous avons choisi de considérer le tourbillon du domaine présentant la plus grosse structure pour calculer le nombre de Stokes.

La figure 4.5 présente les résultats pour  $St = 1.7$ . Il s'agit du nombre de Stokes qui nous a permis dans nos calculs d'obtenir la ségrégation maximale, à savoir un paquet de gouttes de concentration dix fois plus grande ( $\alpha_l = 9,39.10^{-4}$ ) que la concentration initiale ( $\alpha_{l_0} = 1.10^{-4}$ ). On observe une accumulation des gouttes dans les deux principales zones de faible vorticité :  $\alpha_l = 2,82.10^{-4}$  pour  $x = 0.2$  et  $\alpha_l = 9.39.10^{-4}$  pour  $x = 0.35$ , comme si elles étaient éjectées par les tourbillons possédant un maximum de vorticité. P. Février a remarqué le même phénomène tout comme les auteurs cités précédemment.

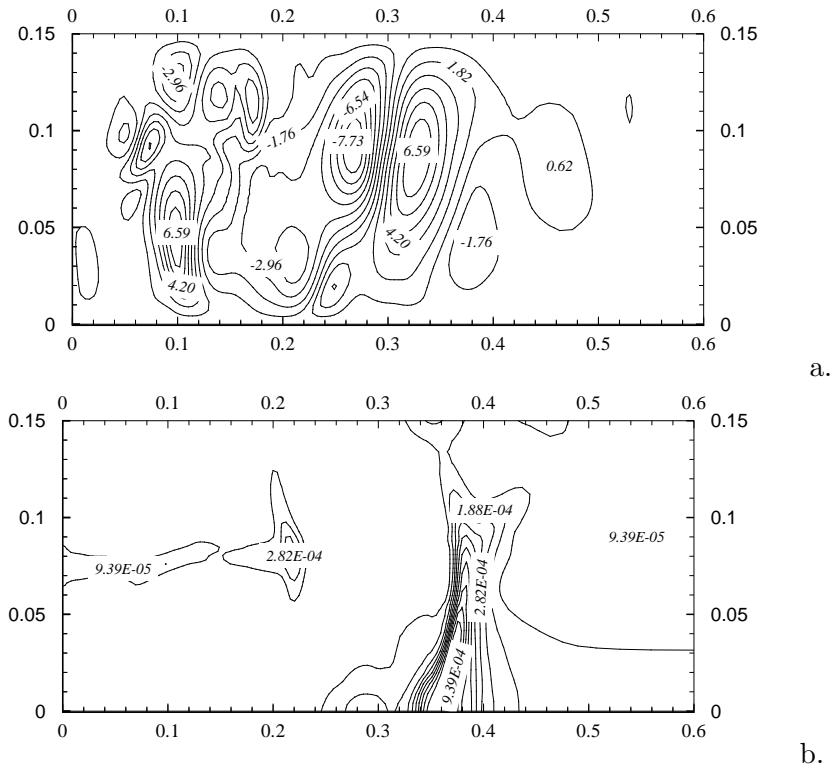
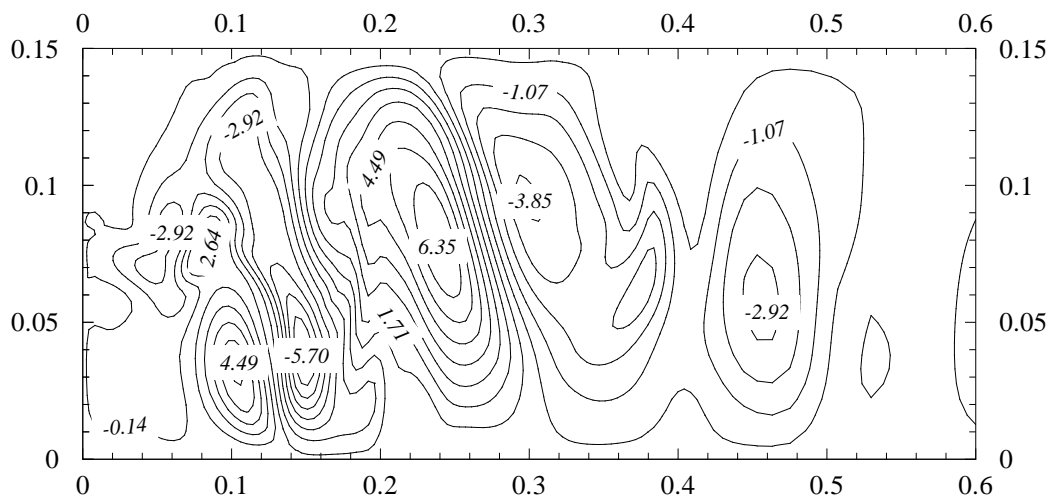


FIG. 4.5 – Jet diphasique - Cas turbulent - Effet de ségrégation -  $St = 1.7$  - a.  $v_g$  - b.  $\alpha_l$

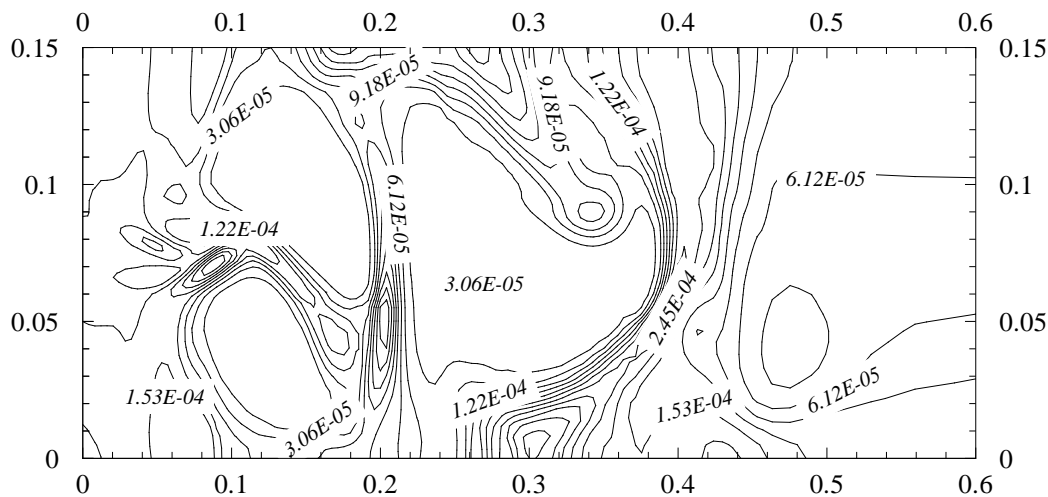


On peut faire varier le nombre de Stokes afin d'étudier l'évolution de la ségrégation. Les figures 4.6 et 4.7 illustrent le phénomène de ségrégation pour  $St = 0.4$  et  $St = 3.9$ . Les contours de  $v_g$  associés à ceux de  $\alpha_l$  permettent de situer le comportement du liquide : sur Fig.4.6, les gouttes sont des scalaires passifs tandis qu'elles ne réagissent pas au gaz, ou peu, sur Fig. 4.6. Pourtant, on note que dans ces deux cas, le niveau de ségrégation maximale est inférieur au niveau donné par le cas  $St = 1.7$ .

Ainsi, la ségrégation passe par un maximum proche de  $St = 1.7$ . On peut tracer le rapport  $\frac{\alpha_{l,max}}{\alpha_{l,moy}}$  en fonction de  $\log(St)$ . Malgré les différences relevées précédemment entre l'étude de P. Février et la notre, on note un bon comportement général du code. En effet, on retrouve dans notre cas l'évolution gaussienne prédite par P. Février, comme le montre Fig. 4.8.



a.



b.

FIG. 4.6 – Jet diphasique - Cas turbulent - Effet de ségrégation -  $St = 0.4$  - a.  $v_g$  - b.  $\alpha_l$

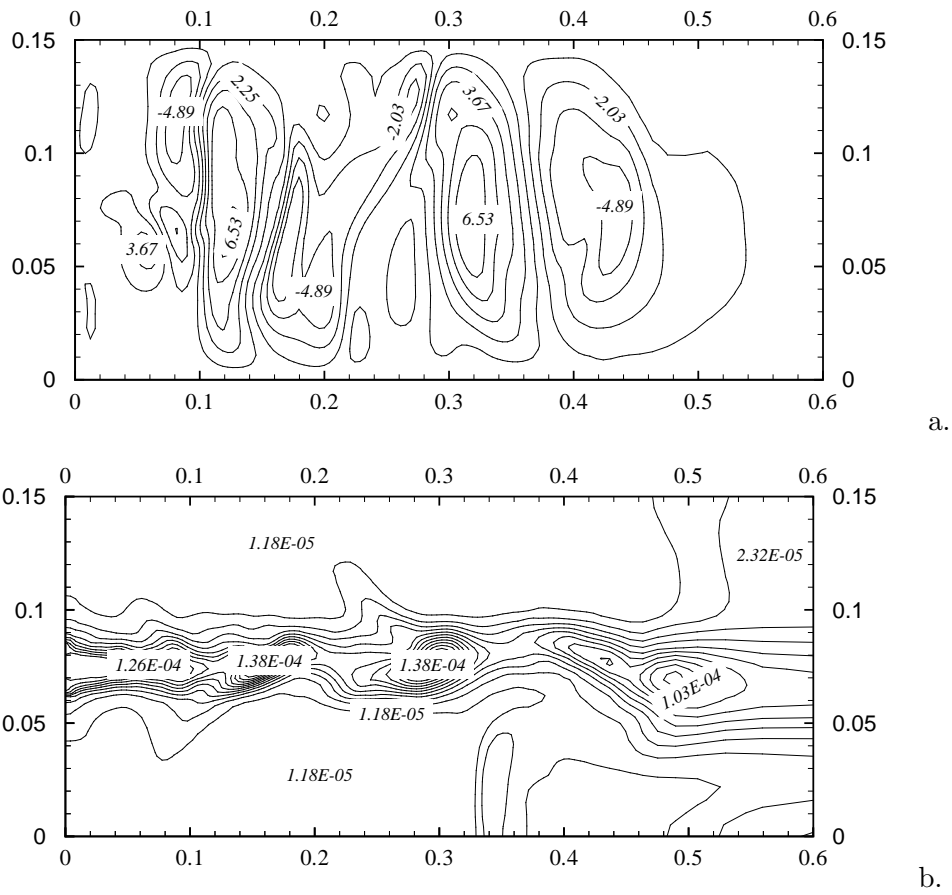


FIG. 4.7 – Jet diphasique - Cas turbulent - Effet de ségrégation -  $St = 3.9$  - a.  $v_g$  - b.  $\alpha_l$

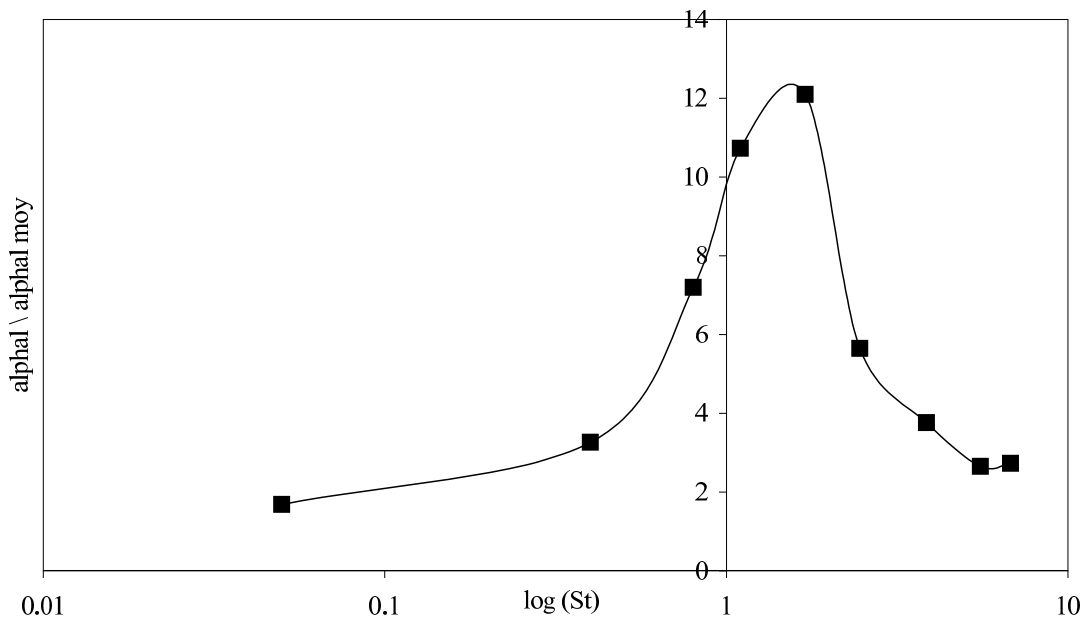


FIG. 4.8 – Jet diphasique - Cas turbulent - Caractérisation de la ségrégation

# Conclusion et perspectives

Ce projet de fin d'études avait pour but la modélisation et le calcul d'un jet diphasique turbulent. La démarche s'est décomposée en 3 étapes :

1. Etude bibliographique du modèle à deux fluides et prise en main du code AVBP\_TPF
2. Validation des équations sur le liquide et en particulier de la traînée
3. Calcul d'un jet diphasique turbulent : étude du comportement du liquide vis-à-vis du gaz et caractérisation de l'effet de ségrégation

Les résultats fournis par l'étape de validation sont encourageants : le modèle à deux fluides implanté dans AVBP\_TPF modélise qualitativement et quantitativement les écoulements simples diphasiques couplés par la traînée. Cette partie du stage est intéressante pour le CERFACS car elle fournit deux cas tests qui permettront de valider de manière rapide et précise les futures étapes de développement du code.

Le calcul d'un jet diphasique turbulent a permis de mettre en oeuvre une démarche d'ingénieur et les résultats obtenus offrent de nombreuses pistes de recherche pour la suite du stage : les comparaisons avec l'étude d'une turbulence homogène isotrope sont en effet intéressantes et vont être poussées plus loin, notamment en ajoutant au modèle une énergie d'agitation pour la phase liquide. En effet, les équations implémentées dans AVBP\_TPF ne modélisent pas que le mouvement moyen. Les fluctuations de sous-maille sont contenues dans l'énergie quasi-brownienne [7].

Le stage se poursuit jusqu'en septembre dans le cadre du DEA Dynamique des Fluides et aura pour objectifs de comparer quantitativement l'approche eulérienne du code avec des résultats expérimentaux et des résultats issus de modèles lagrangiens. La configuration étudiée est présentée dans les travaux de He & Simonin (1994) (cf. [4]). Elle modélise un jet plan d'air chargé en particules de largeur  $E = 7\text{mm}$  avec deux écoulements ascendants co-courants d'air dans un canal rectangulaire vertical de largeur  $D = 25\text{mm}$ . Les expériences ont été réalisées au LSTM d'Erlangen et offrent de nombreux éléments de comparaison, notamment pour les vitesses et les concentrations de particules.

# Bibliographie

- [1] B. Cuenot, A. Kaufmann, J.B. Mossa, and S. Pascaud. *AVBP\_TPF V5.1 - Notations, Equations, Models, Demonstrations*. CERFACS, 2003.
- [2] P. Fevrier. *Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. PhD thesis, Institut Mécanique de Fluides Toulouse, 2000.
- [3] W.G. Gray and P.C.Y. Lee. On the theorems for local volume averaging of multiphase systems. *International Journal of Multiphase Flow*, 3 :333–340, 1977.
- [4] J. He and O. Simonin. Modélisation numérique des écoulements turbulents gaz-solides en conduite verticale. Technical Report HE-44/94/021A, EDF, 1994.
- [5] F.A. Howes and S. Whitaker. The spatial averaging theorem revisited. *Chemical Engineering Science*, 40/8 :1387–1392, 1985.
- [6] A. Kaufmann. Reflections on the implementation of a two phase flow model in avbp. Technical report, CERFACS, 2002.
- [7] A. Kaufmann, O. Simonin, T. Poinsot, and J. Helie. Dynamics and dispersion in eulerien-eulerien two-phase-flows. *Proceedings of the Summer Programm 2002, Center for Turbulence Research*, 2002.
- [8] K. Kuan-yun Kuo. *Principles of Combustion*. John-Wiley & Sons, 1986.
- [9] Randall J. Le Veque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhauser, 1992.
- [10] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, 2001.
- [11] T.J. Poinsot and S.K. Lele. Boundary conditions for direct simulation of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101 :104–129, 1992.
- [12] T. Schönfeld. *The AVBP Handbook V5.2*. CERFACS, 2003.
- [13] W.T. Sha, B.T. Chao, and S.L. Soo. Time- and volume- averaged conservation equations for multiphase flow. In X.-J. Chen, T.N. Veziroglu, and C.L. Tren, editors, *Multiphase Flow and Heat Transfer*, pages 1028–1046, 1989.
- [14] O. Simonin. Combustion and turbulence in two phase flows. Lecture Series 1996-02, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- [15] P.L. Viollet and O. Simonin. Aérodynamique de la combustion. première partie : Introduction à la modélisation des écoulements constitués d’une phase continue contenant des inclusions dispersées en mouvement. Cours Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1993.
- [16] S. Whitaker. A simple geometrical derivation of the spatial averaging theorem. *Chemical Engineering Education*, Winter 1985 :18–21,50–52, 1985.
- [17] S. Whitaker. *The method of volume averaging*. Kluwer Academic Publishers, 1999.

# ANNEXES

# Annexe A

## Cas test Traînée 0D

### A.1 Introduction

#### A.1.1 Objectives of the QPF

The objective of this QPF is to check the availability of AVBP TPF to model the momentum transfer between two phases (liquid droplets and gas) through the drag force. The numerical treatment for small Stokes numbers introduced by A. Kaufmann in the case of one step integration method has been analytically extended to a 3<sup>rd</sup> order Runge-Kutta method and then numerically verified. An academic case (IC1) has been studied before applying the model to an industrial case (IC2).

#### A.1.2 The test cases

The 0.1m long box is initially filled with both gas and droplets with a uniform distribution. All fields are uniform so that the configuration corresponds to a 0D temporal problem. The 1D-mesh is regular and has 100 cells. The left and right faces are defined as periodic boundaries.

The different variations of this case are summarized as :

- Different initial conditions :  
In the first case (IC1), the liquid phase velocity is zero and the gas phase velocity is non-zero. It is the contrary in the second case (IC2).
- Different  $\aleph$  numbers :  
Let  $\tau_p$  be the droplet relaxation time and  $\Delta t$  be the numerical time step imposed by the CFL condition. The  $\aleph$  number is defined as :

$$\aleph = \frac{\tau_p}{\Delta t}$$

Cases corresponding to  $\aleph \gg 1$  and  $\aleph < 1$  have been focused on.

## A.2 Stokes Drag : Analytical solution

The lagrangian Stokes drag for a single particle is usually modelled by :

$$\frac{1}{\tau_p} (u_{i,g} - u_{i,d}) \quad (\text{A.1})$$

where  $u_{i,d}$  is the droplets velocity and  $u_{i,g}$  is the gas velocity.

The relaxation time  $\tau_p$  is given by :

$$\tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18 \rho_g \nu f(Re_d)} \quad (\text{A.2})$$

We will assume a constant  $\tau_p$  with  $f(Re^d) = 1$ .

In the case of two-way coupling, the system of differential equations may be written as :

$$\frac{d}{dt} u_{i,d} = \frac{1}{\tau_p} (u_{i,g} - u_{i,d}) \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{d}{dt} u_{i,g} = -\frac{\kappa}{\tau_p} (u_{i,g} - u_{i,d}) \quad (\text{A.4})$$

where  $\kappa = \frac{\alpha_l \rho_l}{\alpha_g \rho_g}$  is the mass loading factor. Substracting Eqs.(A.4) to (A.3), one obtains a diffiential equation for the relative velocity  $\tilde{u}_i = (u_{i,g} - u_{i,d})$  :

$$\frac{d}{dt} \tilde{u}_i = -\frac{1 + \kappa}{\tau_p} \tilde{u}_i \quad (\text{A.5})$$

The solution of Eq.(A.5) is straightforward and may be used to integrate Eqs.(A.3) and (A.4). The final solutions are :

$$u_{i,d}(t) = u_{i,d}(0) + \frac{1}{1 + \kappa} (u_{i,g}(0) - u_{i,d}(0)) \left( 1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} t} \right) \quad (\text{A.6})$$

$$u_{i,g}(t) = u_{i,g}(0) - \frac{\kappa}{1 + \kappa} (u_{i,g}(0) - u_{i,d}(0)) \left( 1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} t} \right) \quad (\text{A.7})$$

## A.3 Stokes Drag : Numerical treatment for small Stokes numbers

When the Stokes number  $St = \frac{\tau_p}{T_f}$  (where  $T_f$  is a characteristic time for the gas phase) is very small, the particles follow the fluid almost instantaneously and the numerical time step imposed by a CFL condition may be too large compared to the relaxation time of the particles. The drag source terms become then very large, leading to an unstable temporal integration. To overcome this difficulty without reducing the timestep, one may use the above analytical solutions to perform exact local integration.

### A.3.1 Numerical treatment of Stokes drag for one step integration

The analytical solution of Stokes drag with two-way coupling (Eqs.(A.6) and (A.7)) may be used to write the following temporal difference equations :

$$\frac{u_{i,d}(t + \delta t) - u_{i,d}(t)}{\delta t} = (u_{i,g}(t) - u_{i,d}(t)) \frac{1}{1 + \kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{u_{i,g}(t + \delta t) - u_{i,g}(t)}{\delta t} = (u_{i,d}(t) - u_{i,g}(t)) \frac{\kappa}{1 + \kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} \quad (\text{A.9})$$

Subtracting Eq.(A.9) to (A.8), one obtains the temporal difference equation for the relative velocity  $\tilde{u}_i$  :

$$\frac{\tilde{u}_i(t + \delta t) - \tilde{u}_i(t)}{\delta t} = -\tilde{u}_i(t) \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} = -\tilde{u}_i(0) \frac{1}{1 + \kappa} e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} t} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} \quad (\text{A.10})$$

Eqs.(A.8), (A.9) and (A.10) may be used as the discretized forms of Eqs.(A.3), (A.4) and (A.5),

where  $\frac{1}{\tau_p}$  has been replaced by  $\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{1+\kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t}$ . It is easily verified that :

$$\frac{1}{1 + \kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} = \frac{1}{\tau_p} \quad \text{when } \delta t \rightarrow 0, \quad (\text{A.11})$$

demonstrating the consistency of the discretization. On the other hand when  $\tau_p \rightarrow 0$ , one has the following property :

$$\lim_{\frac{\delta t}{\tau_p} \rightarrow \infty} \frac{1}{1 + \kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} = \frac{1}{1 + \kappa} \frac{1}{\delta t} \quad (\text{A.12})$$

This limits the source term to a value proportional to the CFL timestep and the mass loading factor. Therefore, it avoids overshoots when the relaxation time becomes small compared to the CFL timestep.

One may evaluate the difference between this method and the exact integration by taking a Taylor series of expression (A.11) :

$$\frac{1}{1 + \kappa} \frac{\left(1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\right)}{\delta t} = \frac{1}{\tau_p} \left[ 1 - \frac{1}{2} \frac{1 + \kappa}{\tau_p} \delta t + \frac{1}{3!} \left(\frac{1 + \kappa}{\tau_p}\right)^2 \delta t^2 \dots \right] \quad (\text{A.13})$$

This shows that the first order difference due to the limiter is proportional to  $(1 + \kappa) \frac{\delta t}{\tau_p}$ .



### A.3.2 Numerical treatment of Stokes drag for three steps integration

The 3<sup>rd</sup> order low storage Runge-Kutta method can be written in a compact form as :

$$\begin{cases} u^{(0)} = u^n \\ u^{(1)} = u^{(0)} + a\delta t \frac{d}{dt} u^{(0)} \\ u^{(2)} = u^{(0)} + b\delta t \frac{d}{dt} u^{(1)} \\ u^{(3)} = u^{(0)} + \delta t \frac{d}{dt} u^{(2)} \\ u^{n+1} = u^{(3)} \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

where (a,b,1) are the three Runge-Kutta coefficients and where

$$\begin{cases} u^n = u(t) \\ u^{n+1} = u(t + \delta t) \end{cases}$$

Each step of this method is treated as the one step method previously discussed. Therefore, at each step of the Runge-Kutta method, the corrections given by Eqs.(A.8) and (A.9) are used. To guarantee that at each step, the numerical solution corresponds to the exact one given by Eqs.(A.6) and (A.7), a second correction called  $C$  must be added.

– 1<sup>st</sup> step

$$u_{i,d}^{(1)} = u_{i,d}(t + a\delta t) = u_{i,d}(t) + a\delta t C^{(1)} \frac{d}{dt} u_{i,d}(t) \quad (\text{A.15})$$

$$u_{i,g}^{(1)} = u_{i,g}(t + a\delta t) = u_{i,g}(t) + a\delta t C^{(1)} \frac{d}{dt} u_{i,g}(t) \quad (\text{A.16})$$

Subtracting Eq.(A.16) to (A.15), one obtains the expression for the relative velocity  $\tilde{u}_i^{(1)}$  :

$$\tilde{u}_i^{(1)} = \tilde{u}_i(t + a\delta t) = \tilde{u}_i(t) + a\delta t C^{(1)} \frac{d}{dt} \tilde{u}_i(t) \quad (\text{A.17})$$

Taking  $\frac{d}{dt} \tilde{u}_i(t)$  from Eq.(A.10), one has :

$$\tilde{u}_i^{(1)} = \tilde{u}_i(t) - a\delta t C^{(1)} \frac{(1 + \kappa)}{\tau_p^{(1)}} \tilde{u}_i(t) = \tilde{u}_i(t) \left( 1 - \frac{a\delta t(1 + \kappa)C^{(1)}}{\tau_p^{(1)}} \right) \quad (\text{A.18})$$

The analytical solution gives for  $\tilde{u}_i^{(1)}$  :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_i^{(1)} &= \tilde{u}_i(t + a\delta t) \\ &= \tilde{u}_i(t) e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} a\delta t} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Identifying (A.18) and (A.19) gives :

$$\begin{aligned}
C^{(1)} &= \frac{1}{a\delta t \frac{(1+\kappa)}{\tau_p^{(1)}}} \left( 1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} a\delta t} \right) \quad \text{with} \quad \frac{(1+\kappa)}{\tau_p^{(1)}} = \frac{\left( 1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} a\delta t} \right)}{a\delta t} \\
C^{(1)} &= 1
\end{aligned} \tag{A.20}$$

– 2<sup>nd</sup> step

$$u_{i,d}^{(2)} = u_{i,d}(t + b\delta t) = u_{i,d}(t) + b\delta t C^{(2)} \frac{d}{dt} u_{i,d}(t + a\delta t) \tag{A.21}$$

$$u_{i,g}^{(2)} = u_{i,g}(t + b\delta t) = u_{i,g}(t) + b\delta t C^{(2)} \frac{d}{dt} u_{i,g}(t + a\delta t) \tag{A.22}$$

Substracting Eq.(A.22) to (A.21), one obtains the expression for the relative velocity  $\tilde{u}_i^{(2)}$  :

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_i^{(2)} &= \tilde{u}_i(t + b\delta t) = \tilde{u}_i(t) + b\delta t C^{(2)} \frac{d}{dt} \tilde{u}_i(t + a\delta t) \\
&= \tilde{u}_i(t) - b\delta t C^{(2)} \frac{1+\kappa}{\tau_p^{(2)}} \tilde{u}_i(t) e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} a\delta t} \\
&= \tilde{u}_i(t) \left( 1 - b\delta t C^{(2)} \frac{1+\kappa}{\tau_p^{(2)}} e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} a\delta t} \right)
\end{aligned} \tag{A.23}$$

The analytical solution gives for  $\tilde{u}_i^{(2)}$  :

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_i^{(2)} &= \tilde{u}_i(t + b\delta t) \\
&= \tilde{u}_i(t) e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} b\delta t}
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Identifying (A.23) and (A.24) allows to conclude :

$$\begin{aligned}
C^{(2)} &= \frac{e^{\frac{1+\kappa}{\tau_p} a\delta t}}{b\delta t \frac{(1+\kappa)}{\tau_p^{(2)}}} \left( 1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} b\delta t} \right) \quad \text{with} \quad \frac{(1+\kappa)}{\tau_p^{(2)}} = \frac{\left( 1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} b\delta t} \right)}{b\delta t} \\
C^{(2)} &= e^{\frac{1+\kappa}{\tau_p} a\delta t}
\end{aligned} \tag{A.25}$$

– 3<sup>rd</sup> step

$$u_{i,d}^{(3)} = u_{i,d}(t + \delta t) = u_{i,d}(t) + \delta t C^{(3)} \frac{d}{dt} u_{i,d}(t + b\delta t) \tag{A.26}$$

$$u_{i,g}^{(3)} = u_{i,g}(t + \delta t) = u_{i,g}(t) + \delta t C^{(3)} \frac{d}{dt} u_{i,g}(t + b\delta t) \tag{A.27}$$

Substracting Eq.(A.27) to (A.26), one obtains the expression for the relative velocity  $\tilde{u}_i^{(3)}$  :

$$\begin{aligned}\tilde{u}_i^{(3)} &= \tilde{u}_i(t + \delta t) = \tilde{u}_i(t) + \delta t C^{(3)} \frac{d}{dt} \tilde{u}_i(t + b\delta t) \\ &= \tilde{u}_i(t) \left( 1 - \delta t C^{(3)} \frac{1 + \kappa}{\tau_p^{(3)}} e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} b\delta t} \right)\end{aligned}\tag{A.28}$$

The analytical solution gives for  $\tilde{u}_i^{(3)}$  :

$$\begin{aligned}\tilde{u}_i^{(3)} &= \tilde{u}_i(t + \delta t) \\ &= \tilde{u}_i(t) e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t}\end{aligned}\tag{A.29}$$

Identifying (A.28) and (A.29) gives :

$$\begin{aligned}C^{(3)} &= \frac{e^{\frac{1+\kappa}{\tau_p} b\delta t}}{\delta t \frac{(1+\kappa)}{\tau_p^{(3)}}} \left( 1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t} \right) \quad \text{with} \quad \frac{(1 + \kappa)}{\tau_p^{(3)}} = \frac{\left( 1 - e^{-\frac{1+\kappa}{\tau_p} \delta t} \right)}{\delta t} \\ C^{(3)} &= e^{\frac{1+\kappa}{\tau_p} (b\delta t)}\end{aligned}\tag{A.30}$$

## A.4 Summary of Characteristic Run Parameters

### A.4.1 General information

#### General Flow Features

---

---

Governing Equations :	<b>Navier-Stokes</b>
Flow regime :	<b>laminar</b>
Equation type :	<b>dimensional</b>
Turbulence :	<b>no turbulence</b>
Chemistry model :	<b>no chemistry</b>
Number of species :	<b>2</b>
Number of reactions :	<b>0</b>
Inlet temperature :	<b>300 K</b>
Pressure :	<b>1 atm</b>

---

---

#### 1D Grid Parameters

---

---

Number of space dimensions :	<b>1</b>
Element type :	<b>quads</b>
Number of cells :	<b>100</b>
Start in x :	<b>0.</b>
Size in x :	<b>0.1</b>
Size in y :	<b>0.1</b>

---

---

#### Numerical Parameters

---

---

Integration scheme :	1 0 0 0 0
Time integration :	nstage = 3
RK coefficients :	rkc = 0.49 0.49 1.0
CFL numbers :	CFL 1 : 0.7                  CFL 2 : 0.7
Art. visc. coeffs :	2 <sup>nd</sup> order : 0.0              4 <sup>th</sup> order : 0.0
Fourier number :	0.1

---

---

## Computer info

<b>Imhotep</b> 20000 iter - 2 procs	CPU time <i>s</i>	Efficiency <i>μs/node/iter</i>
<b>IC1</b> , $\aleph \gg 1$	32.45	7.94
<b>IC2</b> , $\aleph \gg 1$	32.62	7.99

<b>20000 iter - 2 procs</b>	CPU time <i>s</i>	Efficiency <i>μs/node/iter</i>
<b>IC1</b> , $\aleph < 1$	30.80	7.55
<b>IC2</b> , $\aleph < 1$	32.55	7.98

<b>Imhotep</b> 30 iter - 2 procs	CPU time <i>s</i>	Efficiency <i>μs/node/iter</i>
<b>IC1</b> , $\aleph < 1$	0.45	73.53
<b>IC2</b> , $\aleph < 1$	0.62	100.8

NB : The discrepancy between the efficiency calculated for 30 and 20000 iterations is due to the Input-Output.

## Initial and Boundary Conditions

<b>Fields</b>	P	T	U	$T_l$	$U_l$	$\alpha_l$	d
<b>IC1</b>	101325	300	1	300	0	$1.047 \cdot 10^{-6}$	$50 \cdot 10^{-6}$
<b>IC2</b>	101325	300	0	300	200	$1.047 \cdot 10^{-4}$	$50 \cdot 10^{-6}$

## A.4.2 Examples of data files

### asciiBound example

Grid processing by hip version 1.14.5.  
4 boundary patches.

-----  
Patch: 1  
hip\_per\_inlet\_1  
NO\_BOUNDARY

-----  
Patch: 2  
hip\_per\_outlet\_1  
NO\_BOUNDARY

-----  
Patch: 3  
top: y=0.1  
NO\_BOUNDARY

-----  
Patch: 4  
bottom: y=0  
NO\_BOUNDARY

### TPF file

```
'C7H16'      ! Droplet composition
0            ! Artificial viscosity flag
0.0d0       ! 4th order artif. visco.
0.0d0       ! 2nd order artif. visco.

0.1d0       ! D_gamma - evaporation diffusion
1.0d-10     ! d_mini - clipping
%
```

## run.dat example

```
'../../MESH/mesh'           ! Mesh file
'../../MESH/mesh.asciiBound' ! Ascii Boundary file
'../../SOLUTBOUND/drag.solutBound' ! Boundary solution file
'../../IC1/dragunifgas.sol_0000000' ! Initial solution
'./SOLUTIONS/dragunif15.sol' ! Output files
'./TEMPORAL'                ! Temporal evolution directory

1.0d00    ! Reference length | scales coordinates X by X/reflen

20000     ! Number of iterations

100       ! Number of elements per group (typically of order 100)
1         ! Preprocessor: skip (0), use (1) & write (2) & stop (3)

1         ! Interactive details of convergence (1) or not (0)
100      ! Prints convergence every x iterations
1        ! Stores solution in separate files (1) or not (0)
1000     ! Stores convergence every x iterations

1        ! Euler (0) or Navier-Stokes (1) calculation
0        ! RANS
0        ! Chemistry
0        ! LES
1        ! TPF
0        ! Artificial viscosity
1        ! Steady state (0) or unsteady (1) calculation

0 0 0 0 0          ! Scheme specification
3                ! Number of RK stages
0.49d0 0.49d0 1.0d0 ! RK coefficients
0.7d0           ! CFL parameter for complete update
0.7d0           ! CFL parameter in second order update
0.0d0           ! 4th order artificial viscosity coeff.
0.0d0           ! 2nd order artificial viscosity coeff.
0.1d0           ! Fourier parameter for viscous time-step
```

## A.5 Results and comments

### A.5.1 IC1 : uniform gas velocity field and no droplets velocity

Initially, the droplets distribution is uniform and the dispersed phase volumic fraction is defined by  $\alpha_l = n \frac{\pi d^3}{6} = 1.047.e - 6$ . Eq.(A.2) allows to calculate the relaxation time of the particles :  $\tau_p = 5.35ms$ . The gas velocity is defined by  $u_g = 1m/s$  whereas the droplets are static.

$\aleph \gg 1$

The numerical timestep imposed by the CFL condition is much lower than the relaxation time :  $\Delta t = 1.98\mu s$  giving  $\aleph = 2700$ . 20000 iterations are necessary to obtain the results of Fig.A.1. It confirms that the drag force contributes to the momentum transfer between the two phases. Both velocity profiles reach the same final value. The slopes at the origin of Figs.A.1a. and A.1b. intersect respectively the curve  $u_g = 1m/s$  and the asymptotic curve at the same time  $t = \tau_p$ , which is expected by the theory. The numerical profile matches the analytical one.

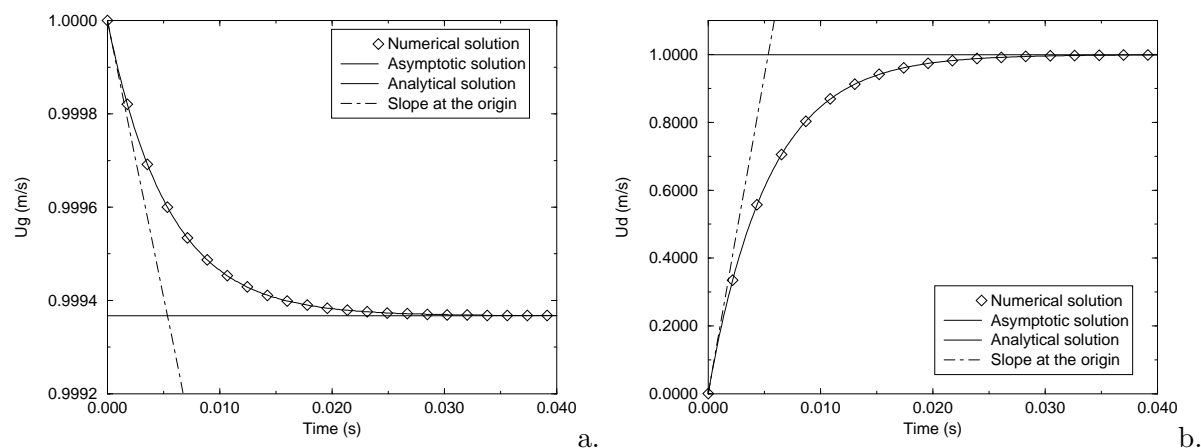


FIG. A.1 – IC1 -  $\aleph \gg 1$  - a. Gas Velocity - b. Liquid Velocity.

$\aleph < 1$

There, the numerical timestep is bigger than the relaxation time :  $\Delta t = 19.8ms$  and  $\aleph = 0.27$ . The evolution of both velocities is presented on Fig.A.2 after 30 iterations. The temporal correction that prevents from overshooting allows to obtain very good numerical profiles.



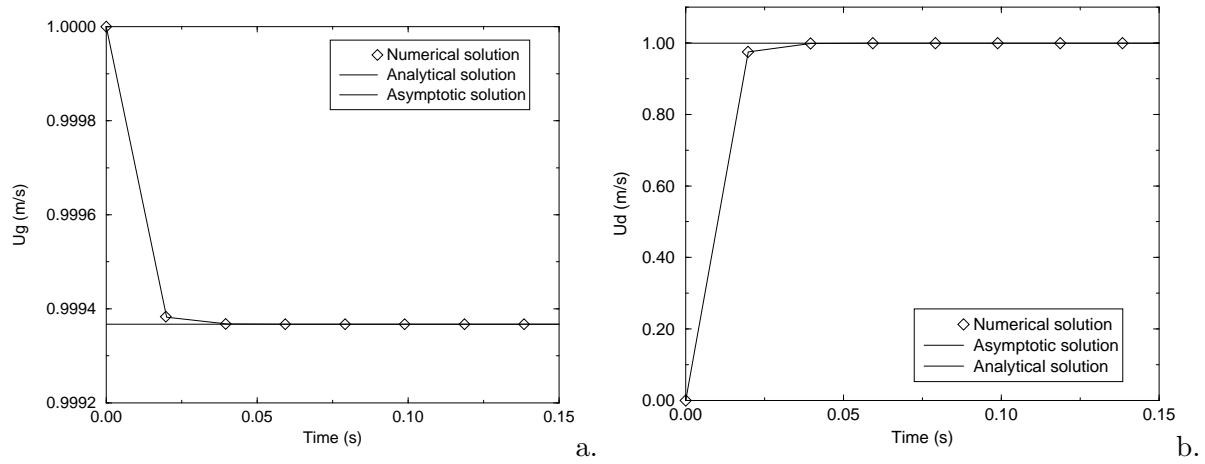


FIG. A.2 – IC1 -  $N < 1$  - a. Gas Velocity - b. Liquid Velocity.

### A.5.2 IC2 : uniform droplets velocity field and no gas velocity

The initial configuration is now closer to industrial conditions. Indeed, the droplets distribution remains uniform but the dispersed phase volumic fraction is now defined by  $\alpha_l = 1.047.e-4$ . The particules keep the same relaxation time as before :  $\tau_p = 5.35ms$ . However, their initial velocity is  $u_d = 200m/s$  whereas the gas velocity is zero. It is well known that these initial conditions allow the gas to increase step by step its velocity. Finally, both the gas and the droplets are expected to reach the same value.

$N \gg 1$

Again,  $\Delta t = 1.98\mu s$  so that  $N = 2700$ . The comparison between the exact profile and the computed values shows very good agreement. The droplets velocity decreases by 95%.

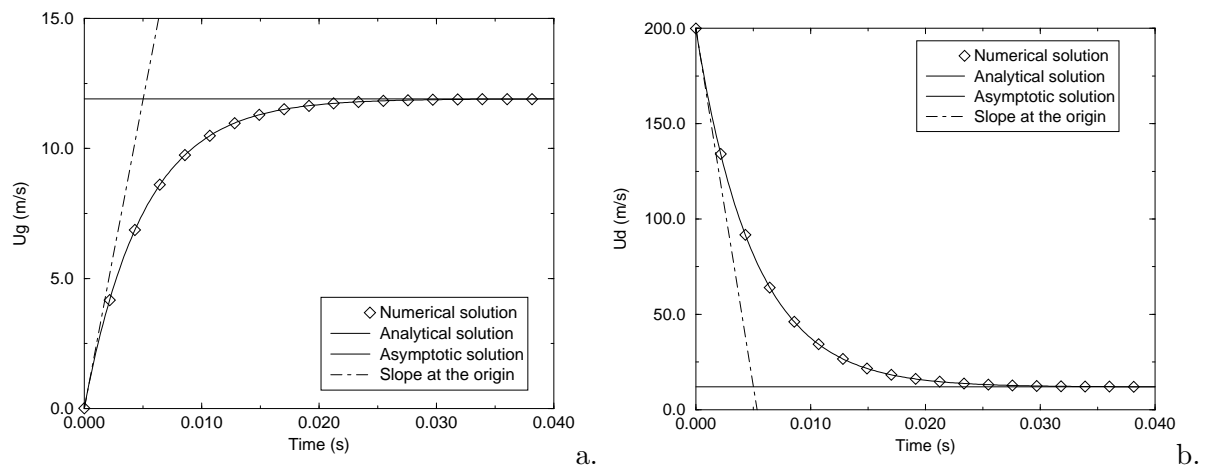


FIG. A.3 – IC2 -  $N \gg 1$  - a. Gas Velocity - b. Liquid Velocity.

$\aleph < 1$

The  $\aleph$  number is small again ( $\aleph = 0.27$ ). In comparison with Fig.A.3, the slope at the origin is much higher, which confirms that the particles follow the gas more rapidly. Once again, the temporal correction allows to obtain very good numerical profiles.

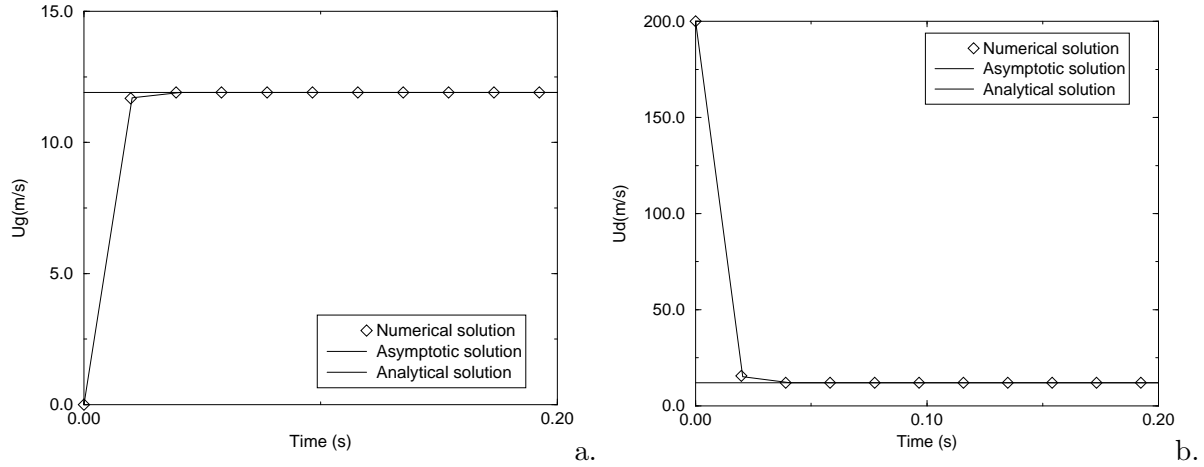


FIG. A.4 – IC2 -  $\aleph < 1$  - a. Gas Velocity - b. Liquid Velocity.

## A.6 Conclusion

The tests carried out enable us to conclude that the drag force model implemented in AVBP V5.1 TPF evaluates the transfer of momentum quantitatively very well whatever the  $\aleph$  number that compares the relaxation time and the numerical timestep.

# Annexe B

## Cas test Traînée 1D

### B.1 Introduction

#### B.1.1 Objectives of the QPF

The objective of this QPF is to check the availability of AVBP TPF to model the momentum transfer between two phases (liquid droplets and gas) through the drag force in a 1D laminar permanent flow.

Only two species ( $N_2$  for the gas and  $C_7H_{16}$  for the liquid) are considered.

An approximate analytical solution reported in the theoretical section has been studied and then used to initialise the computation.

#### B.1.2 The test cases

The 2D-mesh is 0.05m long and 1m high and has 2000 cells. The top and bottom of the rectangle are defined as slipping walls, which makes the flow unidimensional.

The different variations around this case are summarized as :

- Different pressure relaxation coefficients at the outlet
- Different artificial viscosities

The different cases will be discussed in the result section.

### B.2 The analytical solution

Only the drag force is at the origin of the 2-way coupling in this case. There is actually no evaporation, no dispersion through the quasi-brownian energy and no heat transfer. Here are the equations to be solved :

$$\frac{d}{dx}(\alpha_l \rho_l u_l) = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_l \rho_l u_l^2) = -F_d \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_l \rho_l u_l H_l) = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{d}{dx}(n u_l) = 0 \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_g \rho_g u_g) = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_g \rho_g u_g^2) + \frac{d}{dx} P_g = F_d \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{d}{dx}(\alpha_g u_g (\rho_g E_g + P_g)) = -u_g \frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} (u_g - u_l) \quad (\text{B.7})$$

where  $P_g = \rho_g r T_g$  and  $E_g = \frac{u_g^2}{2} + H_g$ .

There is no exact analytical solution. Nevertheless, it is necessary to get an approximate solution that will be a reference solution. Indeed, it will be used first to initialize the problem and then to compare the numerical results with it.

Two main assumptions are required to find the reference solution :

- The liquid velocity keeps much higher than the liquid one provided the droplets are initially much faster than the gas :

$$u_{l0} \gg u_{g0} \Rightarrow \forall x \in [0; L], u_l(x) \gg u_g(x) \quad (\text{B.8})$$

where  $o$  stands for the inlet values.

- The channel is short enough so that a solution developed at the 1<sup>st</sup> order can be used for the gas velocity. Such an assumption induces a condition on the channel length that will be explained later.

### B.2.1 The liquid velocity

Eq. (B.1) shows that :  $\dot{m}_l = \alpha_l \rho_l u_l = \dot{m}_{l0}$ . Using this result in Eq. (B.2), the momentum equation can be written as :

$$\dot{m}_{l0} \frac{d}{dx} u_l = -F_d = \frac{\dot{m}_{l0}}{\tau_p} \left( \frac{u_g}{u_l} - 1 \right) \quad (\text{B.9})$$

Then, the assumption  $u_l \gg u_g$  allows to simplify Eq. (B.9) :

$$\frac{d}{dx} u_l = -\frac{1}{\tau_p} \quad (\text{B.10})$$

The solution of Eq. (B.10) is straightforward :

$$u_l(x) = u_{l0} - \frac{x}{\tau_p} \quad (\text{B.11})$$

The expression of the liquid velocity will be improved once the gaseous field is solved. Then, it will be possible to give the spatial evolution of both the liquid volume fraction  $\alpha_l$  and the droplets number  $n$ .

## B.2.2 The gaseous phase

Eq. (B.5) shows that :  $\dot{m}_g = \alpha_g \rho_g u_g = \dot{m}_{go}$

Again, this result is used in Eq. (B.6) :

$$\frac{d}{dx} (\dot{m}_{go} u_g + P_g) = F_d = -\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( \frac{u_g}{u_l} - 1 \right) \quad (\text{B.12})$$

One may now integrate Eq. (B.12) :

$$\dot{m}_{go} (u_g(x) - u_{go}) + P_g(x) - P_{go} = -\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \int_o^x \left( \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 \right) dz \quad (\text{B.13})$$

The aim is to find a relation between  $P_g$  and  $u_g$  in order to solve Eq. (B.13). Therefore, we will show that the gaseous flow described by Eqs. (B.5), (B.6) and (B.7) is isentropic.

### *Isentropic gaseous flow*

Let's multiply Eq. (B.6) by  $u_g$ . Because the gas flow rate remains constant, Eq. (B.6) becomes :

$$\frac{d}{dx} (\dot{m}_{go} u_g + P_g) = u_g F_d \quad (\text{B.14})$$

The sensible enthalpy that is part of the total energy  $E_g$  can be written as :  $H_g = C_v T$  where  $C_v$  is the molar.

Substracting Eq. (B.14) to Eq. (B.7) allows to link the pressure and the temperature with the velocity :

$$P_g \frac{d}{dx} u_g = -\frac{d}{dx} (\dot{m}_{go} C_v T) = -\dot{m}_{go} C_v \frac{dT}{dx} \quad (\text{B.15})$$

To show the isentropic relation, it is necessary to use both the equation of state and the relation :  $C_v = \frac{r}{\gamma-1}$ . Indeed, we obtain Eq. (B.16)

$$\frac{1-\gamma}{u_g} \frac{d}{dx} u_g = \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} \quad (\text{B.16})$$

Finally, using again the equation  $\dot{m}_g = \dot{m}_{go}$ , one shows the Laplace relation :  $\rho_g^{1-\gamma} T = \rho_{go}^{1-\gamma} T_o$  or  $P_g u_g^\gamma = P_{go} u_{go}^\gamma$ .

Thus, using the Laplace relation  $P_g u_g^\gamma = P_{go} u_{go}^\gamma$ , Eq. (B.13) depends only on the gas and liquid velocities :

$$\dot{m}_{go} (u_g(x) - u_{go}) + P_{go} \left( \left[ \frac{u_{go}}{u_g(x)} \right]^\gamma - 1 \right) = -\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \int_o^x \left( \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 \right) dz \quad (\text{B.17})$$

### *Gaseous velocity*

Provided the channel is short enough, we admit that  $u_g$  can be written as a  $2^{nd}$  order polynomial.

So, we assume :  $u_g(x) = u_{go} + Ax + Bx^2$

Eq. (B.17) will now be developed until the  $2^{nd}$  order in order to determine the coefficients  $A$  and  $B$ .

First, the Laplace relation is used to express the pressure  $P_g$  according to the two previous coefficients :

$$\begin{aligned}
 P_g(x) &= P_{go} \left( \frac{u_{go}}{u_g(x)} \right)^\gamma \\
 P_g(x) &= P_{go} \left( 1 + \frac{A}{u_{go}}x + \frac{B}{u_{go}} \frac{x^2}{2} \right)^\gamma \\
 P_g(x) &= P_{go} \left( 1 - \frac{\gamma A}{u_{go}}x + \gamma x^2 \left[ \frac{(\gamma+1)A^2}{2u_{go}^2} - \frac{B}{u_{go}} \right] \right)
 \end{aligned} \tag{B.18}$$

In Eq. (B.17), one may now evaluate the left term :

$$\begin{aligned}
 \dot{m}_{go}(u_g(x) - u_{go}) + P_{go} \left( \left[ \frac{u_{go}}{u_g(x)} \right]^\gamma - 1 \right) = \\
 \dot{m}_{go}(Ax + Bx^2) + P_{go} \left( -\frac{\gamma A}{u_{go}}x + \gamma x^2 \left[ \frac{(\gamma+1)A^2}{2u_{go}^2} - \frac{B}{u_{go}} \right] \right)
 \end{aligned} \tag{B.19}$$

The same method is used for the  $2^{nd}$  member of Eq. (B.17).  $\left( \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 \right)$  is developed at the  $1^{st}$  order and then integrated :

$$\begin{aligned}
 \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 &= \frac{u_{go} + Az + Bz^2}{u_{lo} - \frac{z}{\tau_p}} - 1 \\
 \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 &= \frac{u_{go}}{u_{lo}} \left( 1 + \frac{A}{u_{go}}z + \frac{z}{u_{lo}\tau_p} \right) - 1
 \end{aligned} \tag{B.20}$$

Thus, we obtain for the  $2^{nd}$  member of Eq. (B.17) :

$$-\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \int_0^x \left( \frac{u_g(z)}{u_l(z)} - 1 \right) dz = -\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( \left[ \frac{u_{go}}{u_{lo}} - 1 \right] x + \left[ \frac{A}{u_{go}} + \frac{1}{u_{lo}\tau_p} \right] \frac{u_{go}}{u_{lo}} \frac{x^2}{2} \right) \tag{B.21}$$

It is now possible to express the coefficients  $A$  et  $B$  :

$$u_g(x) = u_{go} + Ax + Bx^2 \tag{B.22}$$

$$\begin{aligned}
 \text{avec } A &= \frac{\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( 1 - \frac{u_{go}}{u_{lo}} \right)}{\dot{m}_{go} - \frac{P_{go}\gamma}{u_{go}}} \\
 \text{et } B &= \frac{-\frac{\dot{m}_{lo}}{\tau_p} \left( \frac{A}{u_{go}} + \frac{1}{u_{lo}\tau_p} \right) \frac{u_{go}}{2u_{lo}} - \frac{P_{go}\gamma(\gamma+1)A^2}{2u_{go}^2}}{\dot{m}_{go} - \frac{P_{go}\gamma}{u_{go}}}
 \end{aligned}$$

Having the analytical expression of the gas velocity, we can determine the condition required on the channel length  $L$  :  $L \ll \frac{A}{B}$ .

### ***Other gaseous variables expression***

The Navier-Stokes equations allow to determine the spatial evolution developed at the 1<sup>st</sup> order of the other gaseous variables.

As we assume a dilute flow, we can assert  $\alpha_g(x) \sim 1$ . Then, Eq. (B.5) gives the evolution of the gas density :

$$\rho_g(x) = \frac{\rho_{go}u_{go}}{u_g(x)} = \rho_{go} \left( 1 - \frac{A}{u_{go}}x \right) \quad (\text{B.23})$$

The pressure is given by Eq. (B.18) :

$$P_g(x) = P_{go} \left( 1 - \frac{\gamma A}{u_{go}}x \right) \quad (\text{B.24})$$

Finally, the equation of state gives the temperature :

$$T_g(x) = \frac{P(x)}{\rho(x)r} = T_{go} \left( 1 - \frac{A}{u_{go}}x(\gamma - 1) \right) \quad (\text{B.25})$$

### **B.2.3 The liquid phase**

One may now use the gas velocity to modify the source term in Eq. (B.2) and obtain an approximation of the liquid velocity :

$$F_d = -\frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} (u_g - u_l) = -\frac{\alpha_l \rho_l}{\tau_p} \left[ u_{go} + Ax - \left( u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \right) \right] \quad (\text{B.26})$$

$$u_l^2(x) = \left( u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \right)^2 + \frac{x}{\tau_p} (2u_{go} + Ax) \quad (\text{B.27})$$

Integrating Eqs. (B.1) and (B.4) when using the liquid velocity approximation allows to obtain the spatial evolution of the liquid volume fraction and droplets number :

$$\alpha_l(x) = \frac{\alpha_{lo}u_{lo}}{\sqrt{\left( u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \right)^2 + \frac{x}{\tau_p} (2u_{go} + Ax)}} \quad (\text{B.28})$$

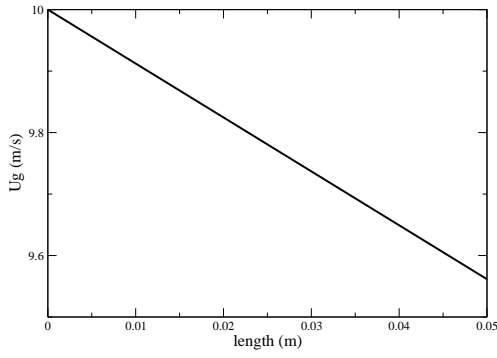
$$n(x) = \frac{n_o u_{lo}}{\sqrt{\left( u_{lo} - \frac{x}{\tau_p} \right)^2 + \frac{x}{\tau_p} (2u_{go} + Ax)}} \quad (\text{B.29})$$

## Conclusion

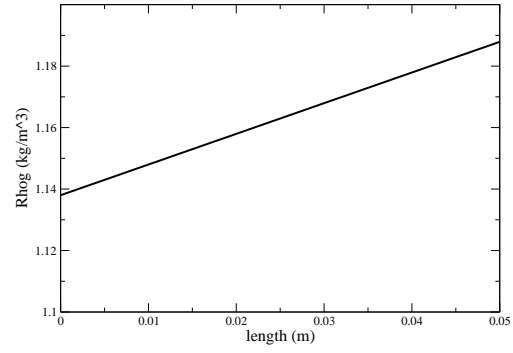
When the condition on the channel length is verified, Fig. B.1 shows that the profiles of the different gas and liquid parameters are quasi-linear. Whereas the liquid velocity decreases through the channel as expected, the gas velocity also decreases despite the drag force. In this case, it is the pressure that increases as if, on this length, the pressure were more powerful than the drag force.

Note that the profiles of Fig. B.1 have been used to compute the initial solution in order to test the code and not the initial conditions influence on the results.

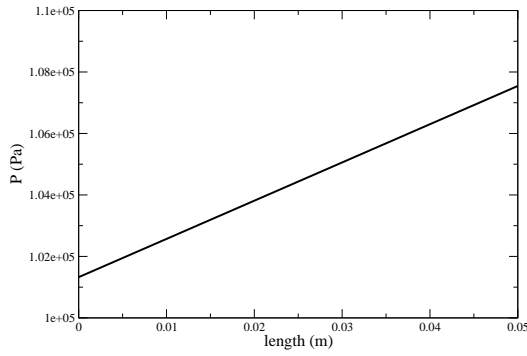




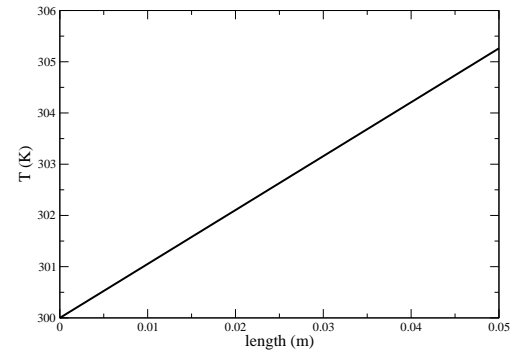
a.



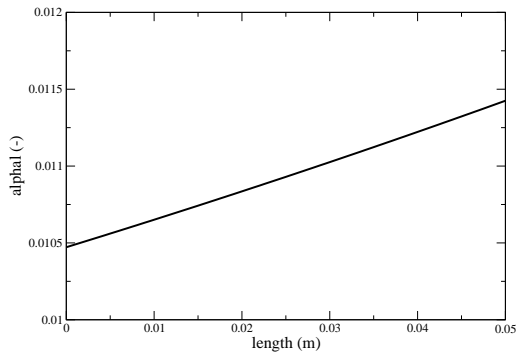
b.



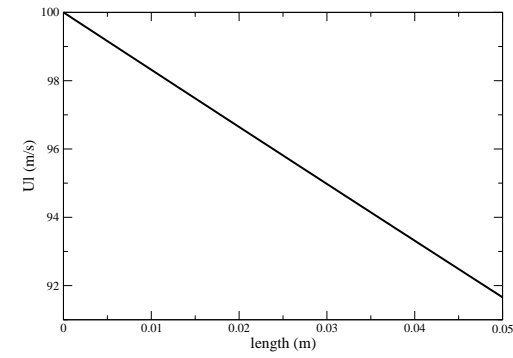
c.



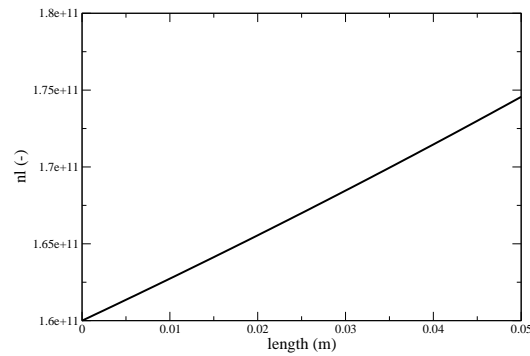
d.



e.



f.



g.

FIG. B.1 – Approximate analytical solution - a. Gas Velocity - b. Gas Density - c. Pressure - d. Gas Temperature - e. Liquid Velocity - f. Liquid Volum Fraction - g. Droplets Number.

## B.3 Summary of Characteristic Run Parameters

### B.3.1 General information

#### General Flow Features

---

---

Governing Equations :	<b>Navier-Stokes</b>
Flow regime :	<b>laminar</b>
Equation type :	<b>dimensional</b>
Turbulence :	<b>no turbulence</b>
Chemistry model :	<b>no chemistry</b>
Number of species :	<b>2</b>
Number of reactions :	<b>0</b>
Inlet temperature :	<b>300 K</b>
Pressure :	<b>1 atm</b>

---

---

#### 2D Grid Parameters

---

---

Number of space dimensions :	<b>2</b>
Element type :	<b>quads</b>
Total number of cells :	<b>2000</b>
Number of nodes :	<b>101 x 21</b>
Length :	<b>0.05 x 1 m</b>
$x_{min} = \Delta x$	<b><math>2.5 \cdot 10^{-4}</math> m</b>
$y_{min} = \Delta y$	<b><math>5 \cdot 10^{-2}</math> m</b>

---

---

#### Numerical Parameters

---

---

Integration scheme :	<b>1 0 0 0 0</b>
Time integration :	<b>nstage = 3</b>
RK coefficients :	<b>rkc = 0.49 0.49 1.0</b>
CFL numbers :	<b>CFL 1 : 0.7          CFL 2 : 0.7</b>
Art. visc. coeffs :	<b><math>2^{nd}</math> order : 0.0          <math>4^{th}</math> order : 0.0</b>
Fourier number :	<b>0.1</b>

---

---

## Computer info

---

---

Target machine :	<b>Imhotep</b>
Number of parallel processors :	<b>4</b>
Number of iterations :	<b>20000</b>
Total physical time :	<b>1.9 x 10<sup>-2</sup>s</b>
Total CPU Time :	<b>1922s</b>
Efficiency :	<b>39.65 <math>\mu</math>s /node/iteration</b>

---

---

## Initial and Boundary Conditions

**Initial solution :** analytical profiles

**Inlet conditions :**

$$\begin{aligned}u_{go} &= 10 \text{ m.s}^{-1} \\u_{lo} &= 100 \text{ m.s}^{-1} \\nl_o &= 16.10^{10} \\\alpha_{lo} &= 1.047 \text{ \%}\end{aligned}$$

---

---

### **GAS**

Inlet : **INLET\_RELAX\_UVW\_T\_Y**  
Outlet : **OUTLET\_RELAX\_P**  
Top and bottom boundaries : **WALL\_SLIP\_ADIAB**

### **LIQUID**

Inlet : **INLET\_TPF\_HARD\_ALPHA\_UVW\_T**  
Outlet : **OUTLET\_TPF**  
Top and bottom boundaries : **WALL\_TPF\_SLIP**

---

---

### B.3.2 Examples of data files

#### asciiBound example

Grid processing by hip version 1.14.5.  
4 boundary patches.

---

Patch: 1  
left: x=0  
INLET\_RELAX\_UVW\_T\_Y  
2  
1  
1  
500.  
500.  
5000.  
5.

---

Patch: 2  
right: x=0.05  
OUTLET\_RELAX\_P  
1  
1  
1  
250000.

---

Patch: 3  
top: y=1  
WALL\_SLIP\_ADIAB

---

Patch: 4  
bottom: y=0  
WALL\_SLIP\_ADIAB

#### TPF file

```
'C7H16'      ! Droplet composition
1           ! Artificial viscosity flag
0.04d0      ! 4th order artif. visco.
0.01d0      ! 2nd order artif. visco.

0.1d0       ! D_gamma - evaporation diffusion
1.0d-10     ! d_mini - clipping
```

## asciiBound TPF example

Grid processing by hip version 1.14.5.

4 boundary patches.

---

Patch: 1  
left: x=0  
INLET\_TPF\_HARD\_ALPHA\_UVW\_T

---

Patch: 2  
right: x=0.05  
OUTLET\_TPF

---

Patch: 3  
top: y=1  
WALL\_TPF\_SLIP

---

Patch: 4  
bottom: y=0  
WALL\_TPF\_SLIP

## run.dat example

```
'../MESH/mesh'           ! Mesh file
'/mesh.asciiBound'      ! Ascii Boundary file
'../MESH/mesh.asciiBound_tpf' ! Ascii Boundary file
'../SOLUTBOUND18/bc_sm_ug_corr18.solutBound' ! Boundary solution file
'../INIT18/bc_sm_ug_corr18.sol_init' ! Initial solution
'/SOLUTIONS/bc_sm_ug_corr18_sol' ! Output files
'/TEMPORAL'             ! Temporal evolution directory

1.0d00    ! Reference length | scales coordinates X by X/reflen

20000     ! Number of iterations

100       ! Number of elements per group (typically of order 100)
1         ! Preprocessor: skip (0), use (1) & write (2) & stop (3)

1         ! Interactive details of convergence (1) or not (0)
500      ! Prints convergence every x iterations
1        ! Stores solution in separate files (1) or not (0)
1000     ! Stores convergence every x iterations

1        ! Euler (0) or Navier-Stokes (1) calculation
0        ! RANS
1        ! Chemistry
0        ! LES
1        ! TPF
0        ! Artificial viscosity
1        ! Steady state (0) or unsteady (1) calculation

0 0 0 0 0          ! Scheme specification
3                ! Number of RK stages
0.49d0 0.49d0 1.0d0 ! RK coefficients
0.7d0           ! CFL parameter for complete update
0.7d0           ! CFL parameter in second order update
0.02d0          ! 4th order artificial viscosity coeff.
0.1d0           ! 2nd order artificial viscosity coeff.
0.1d0           ! Fourier parameter for viscous time-step
```

## B.4 Results and comments

### B.4.1 Global results

As previously explained, the computation has been initialised with the approximate analytical solution presented in the theoretical section. At the inlet, the gas characteristics are imposed with  $u_{go} = 10 \text{ m.s}^{-1}$ ,  $P_o = 1.013 \text{ Pa}$  and  $T_o = 300 \text{ K}$  and the liquid variables are imposed with  $u_{lo} = 100 \text{ m.s}^{-1}$ ,  $nl_o = 16.10^{10}$  and  $\alpha_{lo} = 1.074 \%$ . Thus, the droplets are characterised by the relaxation time :  $\tau_p = 5.3510^{-3} \text{ s}$ .

Figures B.3 and B.2 show the results obtained when using a high pressure relaxation coefficient (250000) and some 2<sup>nd</sup> order artificial viscosity (0.2) on the liquid phase. The numerical profile matches the analytical one very well, especially for the dispersed phase. If we consider the gaseous one, the code validates the assumption for the gas velocity : Fig. B.3a. shows a linear evolution for the velocity. Besides, there is no difference between the analytical and numerical profiles of the pressure and the density. We only notice a small discrepancy in the levels of these variables. It must be due to the pressure relax coefficient that is still not high enough.

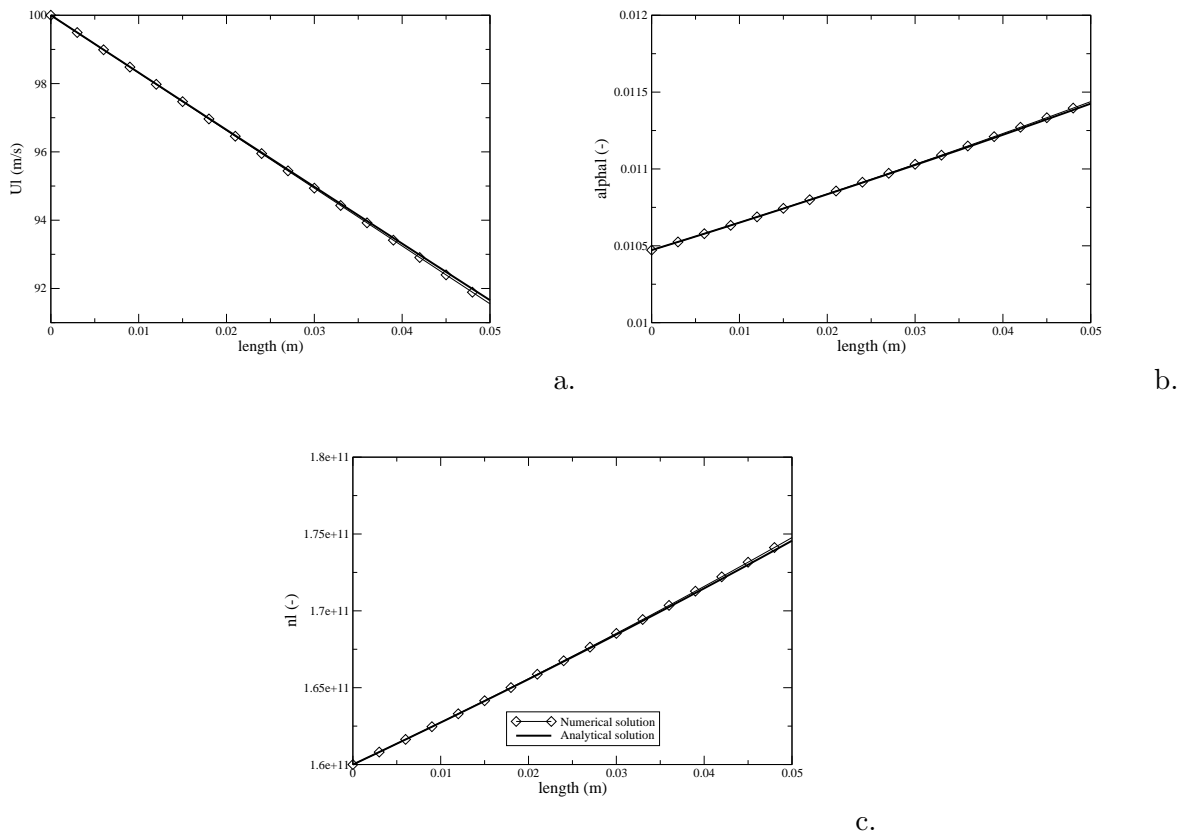
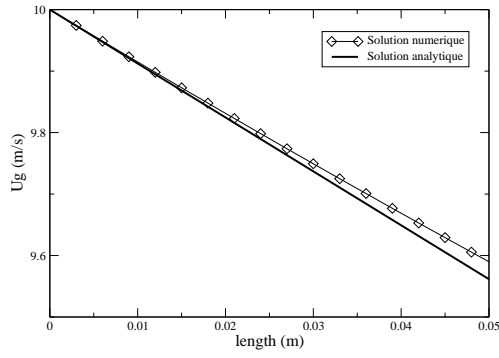
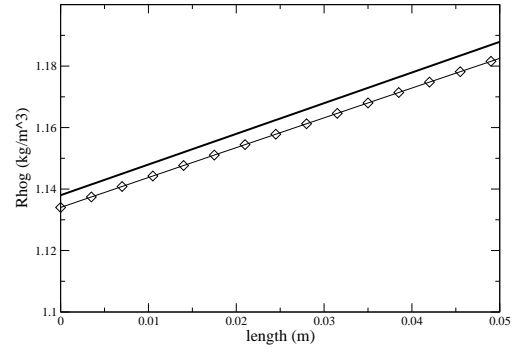


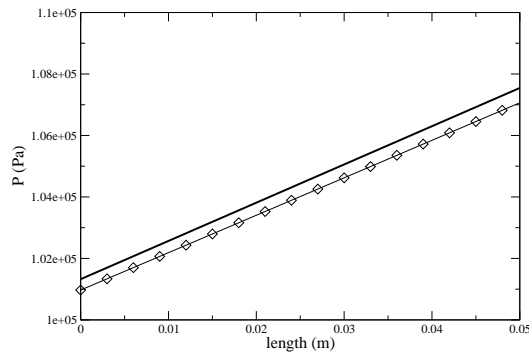
FIG. B.2 – Global results for the liquid - a. Liquid Velocity - b. Liquid Volum Fraction - c. Droplets Number.



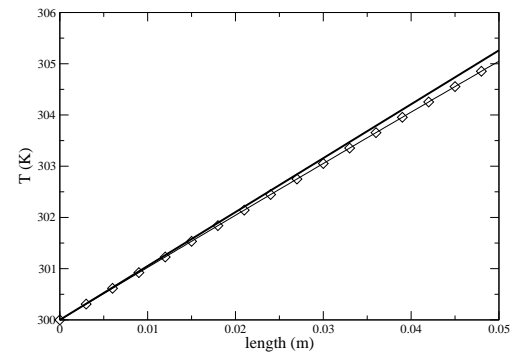
a.



b.



c.



d.

FIG. B.3 – Global results for the gas - a. Gas Velocity - b. Gas Density - c. Pressure - d. Gas Temperature.



## B.4.2 Influence of the artificial viscosity

This part puts forward the necessity to add some artificial viscosity on the two-phase-flow variables to keep the results first stable and then without numerical perturbations.

Figure B.4 shows the wiggles that appear both on the liquid variables and the gas velocity if little viscosity ( $\text{smu2} = 0.0$ ,  $\text{smu4} = 0.02$ ) is used for the liquid. Note that it is impossible to make the computation converge without any viscosity.

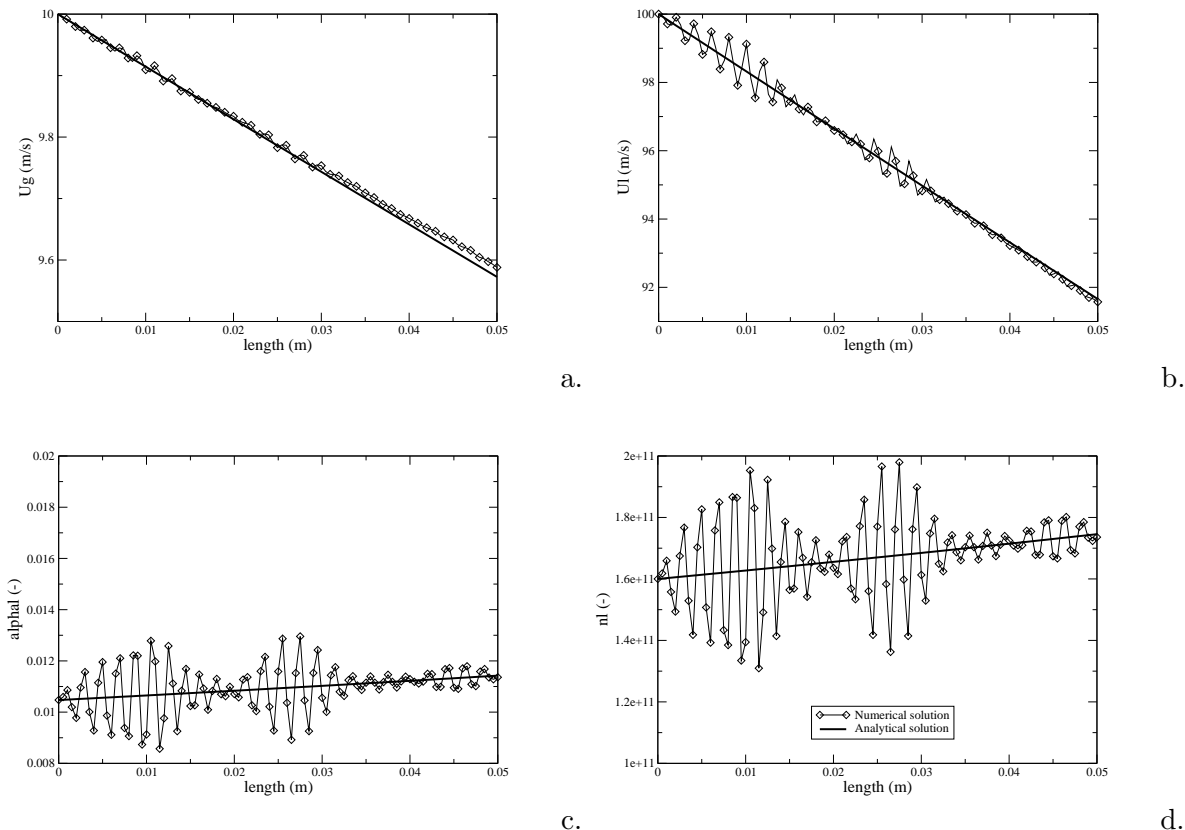


FIG. B.4 – Wiggles - a. Gas Velocity - b. Liquid Velocity - c. Liquid Volum Fraction - d. Droplets Number.

Several tests have been computed to determine the order of magnitude of the  $2^{\text{nd}}$  and  $4^{\text{th}}$  order artificial viscosities necessary in this case. Here are the conclusions :

- The gas is not responsible for this destabilization as it makes no difference to run with zero artificial viscosity on the gaseous phase. Therefore, this condition has been retained for further tests.
- The  $2^{\text{nd}}$  order artificial viscosity is not efficient in this case. Thus, no  $2^{\text{nd}}$  order artificial viscosity has been added on the dispersed phase.
- Finally, only some  $4^{\text{th}}$  order artificial viscosity allows to avoid the spurious modes of Fig.(B.4) and so, to obtain the results of Figs.(B.3) and (B.2). It appears that the inferior limit is 0.02 for this case. Thus, there is no longer oscillations of the liquid variables. The gas velocity that

was previously affected through the drag force is also smoothed.

### B.4.3 Influence of the Pressure relax coefficient

This section aims at showing the effect of the drag force on relaxed pressure boundaries.

Fig.(B.5) shows the results when the pressure relaxation coefficient is divided by 5 (50000 compared to the previous 250000) and some artificial viscosity is added on the liquid phase ( $\text{smu2} = 0.02$ ,  $\text{smu4} = 0.00$ ). When comparing with the analytical solution, it is clear that the code is unable to reach the level expected at the outlet ( $P_{outlet} = 1.075 \text{ Pa}$ ). However, the slope of the pressure curve shows qualitatively very good agreement with the theory. The same conclusion can be made for the gas density that evolves similarly because of the state equation. No noticeable changes affect the gas velocity and temperature, and the liquid variables.

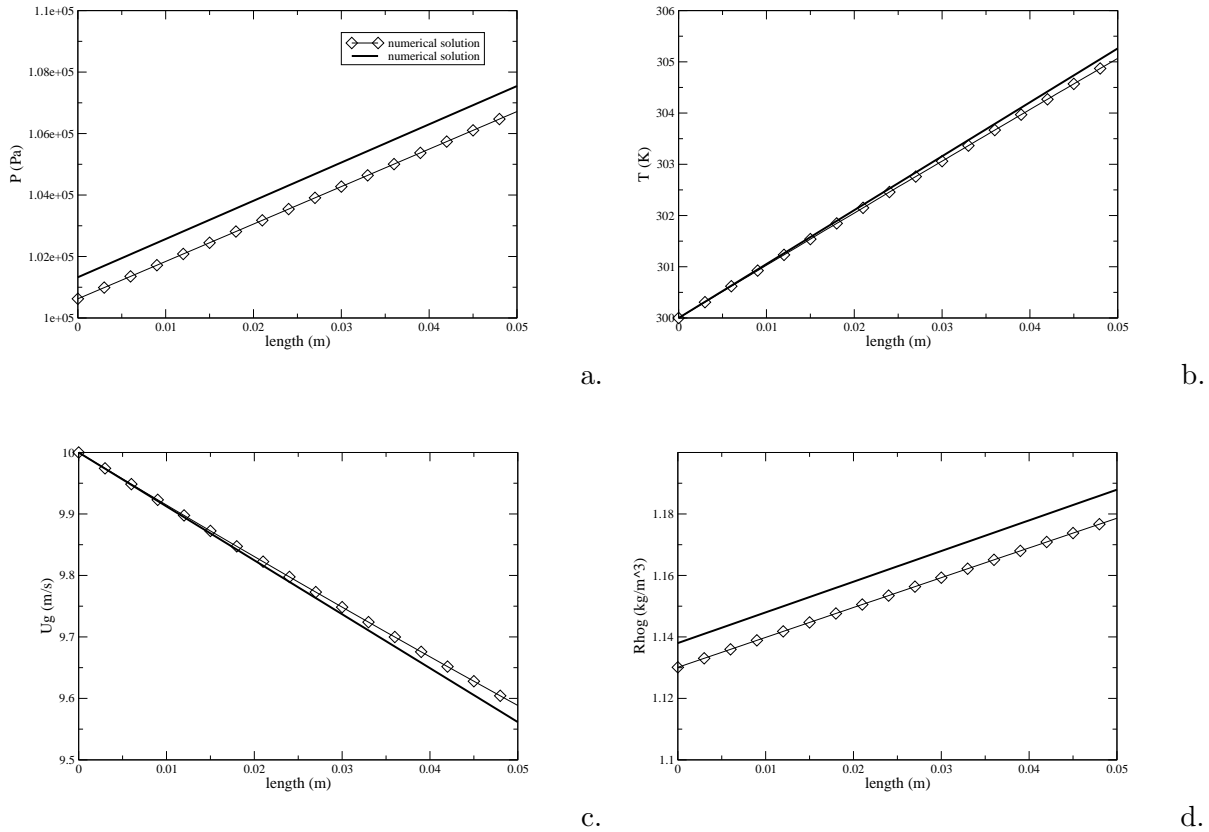


FIG. B.5 – Pressure relax coefficient = 50000 - a. Pressure - b. Gas Temperature - c. Gas Velocity - d. Gas Density

## B.5 Conclusion

The tests carried out enable us to conclude that the drag force model implemented in AVBP V5.1 TPF evaluates the transfer of momentum quantitatively very well in a 1D laminar permanent flow.

Users must be warned of the choice of artificial viscosity level. The dispersed phase destabilises the two-phase-flow and some 4<sup>th</sup> order artificial viscosity must be used for the liquid.

Note also the use of a high relaxation coefficient for the pressure at the outlet to be able to maintain the final level of the gas pressure.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>5</b>
0.1 Le CERFACS : Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique . . . . .	5
0.2 Contexte d'études . . . . .	5
0.3 Objectifs du stage . . . . .	6
<b>1 Le modèle eulérien à deux fluides</b>	<b>7</b>
1.1 Rappel des équations locales instantanées . . . . .	7
1.2 Approche statistique : définition des opérateurs de moyenne . . . . .	7
1.3 Equations en grandeurs moyennes principales . . . . .	9
<b>2 Cadre du stage</b>	<b>10</b>
2.1 Simplification du modèle eulérien à deux fluides . . . . .	10
2.2 L'outil numérique : AVBP_TPF . . . . .	12
<b>3 Validation</b>	<b>13</b>
3.1 Etapes de l'étude . . . . .	13
3.2 Traînée 0D : correction de l'intégration temporelle . . . . .	13
3.3 Validation de la traînée dans un canal monodimensionnel laminaire en régime permanent . . . . .	17
3.4 Résolution numérique de l'équation de Burgers . . . . .	23
3.5 Conclusion . . . . .	26
<b>4 Jet diphasique bidimensionnel turbulent</b>	<b>27</b>
4.1 Présentation du problème . . . . .	27
4.2 Choix du maillage . . . . .	27
4.3 Conditions initiales et aux limites. . . . .	28
4.4 Analyse des résultats . . . . .	29
<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>35</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>36</b>
<b>ANNEXES</b>	<b>37</b>

<b>A Cas test Traînée 0D</b>	<b>38</b>
A.1 Introduction . . . . .	38
A.2 Stokes Drag : Analytical solution . . . . .	39
A.3 Stokes Drag : Numerical treatment for small Stokes numbers . . . . .	39
A.4 Summary of Characteristic Run Parameters . . . . .	44
A.5 Results and comments . . . . .	48
A.6 Conclusion . . . . .	50
<b>B Cas test Traînée 1D</b>	<b>51</b>
B.1 Introduction . . . . .	51
B.2 The analytical solution . . . . .	51
B.3 Summary of Characteristic Run Parameters . . . . .	58
B.4 Results and comments . . . . .	63
B.5 Conclusion . . . . .	67