14<sup>ème</sup> ECOLE DE PRINTEMPS de Mécanique des Fluides Numérique



Porquerolles, du 31 mai au 6 juin 2015

# Modélisation des écoulements diphasiques dans les systèmes propulsifs aéronautiques

#### Jean-Luc Estivalezes

ONERA

École organisée à l'initiative du Réseau MFN avec le soutien de la formation permanente du CNRS

Comité d'Organisation B. Daly, N. Grenier, W. Herreman, L. Mathelin, B. Podvin, V. Ronflé, A. Sergent et C. Tenaud



# Modélisation des écoulements diphasiques dans les systèmes propulsifs aéronautiques

Jean-Luc Estivalezes



retour sur innovation



### Chapter I: Quelques exemples de systèmes propulsifs aéronautiques et spatiaux



retour sur innovation

# **Propulsion spatiale i)**





# **Propulsion spatiale ii)**

Moteur cryogénique Vulcain ARIANE 5



Gaz chauds VULCAIN







# **Propulsion spatiale iii)**

#### Moteur à propulsion solide: EAP ARIANE 5





# **Propulsion aérobie i)**



# **Propulsion aérobie ii)**



Secteur d'une chamber de combustion aérobie



## Phénomènes physiques dans une chambre de combustion aérobie



Main Physical phenomena related to the liquid phase in turbojet combustion chambers



- Propulsion solide:
  - Combustion proche de la surface du propergol
  - Evolution de la phase dispersée (Al2O3) dans la chambre: dispersion turbulente, collision coalescence, fragmentation, interaction avec les parois
- Propulsion liquide ou aérobie:
  - Atomisation primaire de la phase liquide (assistée ou pas)
  - Production de la phase dispersée
  - Evolution de la phase dispersée: dispersion turbulente, collision coalescence, fragmentation, interaction avec les parois, combustion



# Visualisation of the two phase flow during the ignition phase (Mercato Bench – ONERA)







#### Chapter II: Modélisation de l'atomisation primaire de carburant



retour sur innovation

## **Assisted atomization : canonical experiments**



Plane sheared liquid sheet (ONERA/DMAE)

- aircraft engine
- Ug=30 m/s, UI=1m/s
- Air-Water at ambiant pressure

Round sheared liquid jet (LEGI)

- launcher engine
- Ug=22 m/s UI=0.2 m/s
- Air-Water at ambiant pressure





## Contexte général Atomisation assistée: Un problème multi-échelle



#### Atomisation « air-blast » (assistée) d'une nappe plane

- Une nappe liquide fine est injectée et cisaillée par deux courant gazeux à haute vitesse
  - Des instabilités diphasiques déclenchées par le cisaillement fragmentent progressivement la nappe

Longueur du canal ≈ 30 *cm* 

#### **Problèmes**

- Multi-échelle ~ 10<sup>4</sup>
- Rapport de densité ~10<sup>3</sup>
- Cisaillement gaz-liquide ~10-100 m.s<sup>-1</sup>

Comment pouvons-nous simuler ce phénomène complexe avec les outils numériques d'aujourd'hui?

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

13

## Contexte général Objectifs

- Comprendre les phénomènes physiques propres à l'atomisation
- Aller vers des simulations prédictives d'une chambre de combustion complète, de l'atomisation jusqu'à la combustion

#### Approche DNS:

#### Outil orienté à la compréhension



#### Approche LES (industrielle) :

#### Vers la simulation complète du foyer



Reactive two phase LES simulation of a TLC burner, Luc-Henry Dorey PhD Thesis, ONERA, 2011

#### Maillages nécessaires excessifs pour les calculateurs d'aujourd'hui

L'atomisation n'est pas prise en compte. Le spray est directement injecté dans le foyer



## **Contexte général** Approche multi-échelle

#### DNS



LSS (Large Scale Simulation)



### Approche DNS Outils numériques

- Méthode couplée LS/VOFGhost-Fluid
  - Robustesse, conservation de la masse
- Raffinement adaptatif du maillage
  - Raffinement par « oct-tree » centré sur l'interface
- > Principe du couplage multi-échelle
  - Petites inclusions:
    - Sous-résolues par le CLSVOF (2-6 cellules)
      - $\rightarrow$  la formation du spray force un raffinement de maillage

#### massif

- Transformation des gouttes stables en sphères rigides
  - Transport Lagrangien, loi de trainée
    - → si l'on permet du dé-raffinement, on peut passer sur un traitement à phase dispersée (bien moins couteux)
- Couplage inverse, impact des gouttes vers liquide











## Approche DNS Test : impact de goutte, We = 272



17

## Approche DNS Test : impact de goutte sur surface libre



B. Dipierro et D. Zuzio, COFFECI, 2013



## Approche DNS Test : atomisation assistée de nappe liquide

- > DNS de l'atomisation de nappe
- Comparaison avec résultats expérimentaux ONERA
  - Longueur de rupture moyenne



	Freq. simulation	Freq. experience	Break-up length simulation	Break-up length experience
Ug = 17 m/s	720 Hz	450 Hz	6 mm	7.7 mm
Ug = 25 m/s	1150 Hz	600 Hz	4 mm	5.6 mm

Sarthou A., Zuzio D., Estivalèzes J.L., Multiscale Euler-Lagrange method for parallel simulation of atomization induced by air-blast planar injection. 21st AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 2013

#### Approche aux grandes échelles Modèle multi-fluide et phase dispersée

- On résout l'atomisation avec deux méthodes couplées
  - > Multi-fluide pour le cœur liquide
  - > Phase dispersée pour le spray
- Solveur multi-fluide pour le cœur liquide (-)
  - > SLOSH → CEDRE (collaboration DEFA/DSNA)
  - Méthode à interface diffuse sur maillages non structurés



Interface  $\alpha=0.5$ 

- Spray traité par solveur à phase dispersée (I)
  - Résolution des équations de Boltzmann
  - > CEDRE → SPARTE, SPIREE (DMAE, DEFA)







#### Numerical Tools The separated phase solver

- Choice for the "separated" two-phase flow solver: diffuse interface method
  - Adapted to finite volume methods and unstructured meshes
  - Conservative (deals with high density ratios)
  - Multi-fluid
- Derivation of the model (synthesis)

Starting from then 7 eq. (2 velocities, pressures, temperatures) Baer-Nunziato



→ 4 equations LHF (Locally Homogeneous Flow) model

- Multi-fluid model
  - General form

$$\frac{\partial \mathbf{Q}(\mathbf{U})}{\partial t} + \nabla [F_c(\mathbf{U}) - F(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U})] = A(\mathbf{U})$$

$$\mathbf{Q}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \rho Y_1 & \dots & \rho Y_{ng} & \rho Y_l & \rho \mathbf{v} & \rho e_{tot} \end{pmatrix}^t$$
$$\mathbf{U}(\mathbf{Q}) = \begin{pmatrix} P & T & \mathbf{v} & Y_1 & \dots & Y_{ng} & Y_l \end{pmatrix}^t$$

- Multiple fluids composed by arbitrary number of chemical species
- CSS surface tension model for each fluid couple (detailed in the annexes)
- > Thermodynamic closure:
  - Ideal gaz law for gas species
  - Weakly compressible for liquid phase



#### Approche aux grandes échelles Modèle d'atomisation

- Transfert LOCAL de masse liquide des zones sous résolues par le multi-fluide vers le solveur à phase dispersée
  - Couplage volumique « 2-way » en masse, moment et énergie
- Conditions d'activation
  - Dépendance de la fraction volumique, du gradient, du rotationnel locale...
- Le modèle d'atomisation donne
  - Masse des gouttes
  - Position initiale
  - Vitesse initiale
  - > (Diamètre imposé)
- L'opération "inverse" a été développée
  - Modèle de ré-impact
  - Testé avec SLOSH



ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

Zuzio D., Estivalèzes J.L., Blanchard G., Numerical Simulation of primary and secondary atomization. Comptes Rendus Mécanique, 2012

## Approche aux grandes échelles Atomisation d'une nappe plane



Thèse G. Blanchard, ONERA, 2014



### Approche aux grandes échelles Atomisation d'une nappe plane

- Mesures de fréquence de battement et longueur de rupture
- Comparaison avec expériences ONERA (Thèse B. Dejean, 2014)
  - > Très bon accord sur les tendances
  - Comportement cohérent avec simulations DNS



Blanchard G., Villedieu Ph., Zuzio D., Numerical simulation of primary atomization of a sheared liquid sheet. Part1-2; 25th ILASS, 2013



### Approche aux grandes échelles Formation d'un film à paroi et ré-atomisation



Thèse G. Blanchard, ONERA, 2014



### Approche aux grandes échelles Atomisation d'une nappe annulaire avec vrillage

- Méthodologie portée sur plateforme CEDRE
- Calcul exploratoire sur configuration réelle avec CEDRE (collaboration ONERA/CNRS, projet FIRST)







# Chapter III: Definitions and classification of the different regimes of dispersed two phase flows



retour sur innovation



# What is a dispersed two-phase flow ? Two-phase flows may have very different topologies => very different mathematical models



#### **Examples of two-phase flow toplogies**

Film model (St Venant equations), VOF models, two-fluid models, phase-field models, **dispersed two-phase flow models**, .....





# What is a dispersed two-phase flow ?



## **Examples of dispersed two-phase flows**

**Dispersed two-phase flows** (e.g. **bubbly flows, gas-droplet flows, fluid-particle flows**) are involved in a very wide range of natural and industrial processes : cloud formation, sedimentation, vulcanology, atmospheric pollution, oil extraction, **combustion engine**, fluidized bed, heat exchanger....



## Number density of dispersed two-phase flow



• **Implications**:  $\delta V$  has to be large enough to ensure converged statistics



# **Volume fraction**

• For the particle phase, take the volume of particle phase over the total volume

$$lpha_d = \lim_{\delta V o \delta V^o} rac{\delta V_d}{\delta V}$$

• For the gas or carrier phase (also known as void fraction) :

$$lpha_c = \lim_{\delta V o \delta V^o} rac{\delta V_c}{\delta V} = 1 - lpha_d$$





## **Bulk or apparent densities**

The bulk dispersed phase density is given by:

 $\rho_d^b = \alpha_d \rho_d$ 

The bulk gaseous density is given by

 $\rho_c^b = (1 - \alpha_d) \rho_c$ 

The mixing density is given by:

$$\rho_m = \rho_c^b + \rho_d^b = (1 - \alpha_d)\rho_c + \alpha_d\rho_{dk}$$

The loading factor is written by:

$$Z = \frac{\alpha_d \rho_d U_d}{(1 - \alpha_d) \rho_c U_c} = \frac{\rho_d^{\ b} U_d}{\rho_c^{\ b} U_c} = \text{dispersed}$$

phase mass flux /continuous phase mass flux (mainly applied in gas-solid two phase flows)



# Inter-particle spacing

When can particle-particle interaction could be neglected ?

- > ppi negligeable if L/D > 10
- > Square box arrangement :

$$\alpha_d = \frac{\pi D^3}{6L^3}$$

▶ ppi negligeable if  $\alpha_d$  < 5.10<sup>-4</sup>





# **Classification 1)**





# **Classification 2)**

#### • One-way coupling

- Gas affects particles through drag, evaporation

#### • Two-way coupling

- Gas affects particles through drag, evaporation
- Particles affect gas through drag, evaporation

#### • Four-way coupling

- Gas affects particles through drag, evaporation
- Particles affect gas through drag, evaporation
- Particles affect each other through collisions, coalescence


### Particle dynamic time scale estimate 1)

#### Particle relaxation time for spherical particle or droplet

Particle equation of motion

$$mrac{doldsymbol{v}}{dt}=oldsymbol{F}$$

> Drag force (solid or liquid particle)  $\boldsymbol{F} = c_D \frac{\rho_c}{2} \frac{\pi D^2}{4} |\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}| (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v})$ 

$$mrac{doldsymbol{v}}{dt}=c_Drac{
ho_c}{2}rac{\pi D^2}{4}|oldsymbol{u}-oldsymbol{v}|(oldsymbol{u}-oldsymbol{v})$$



## **Particle dynamic time scale estimate 2)**

> Introducing the particle Reynolds number based on relative velocity as

$$ext{Re}_{ ext{rel}} = rac{
ho_c D |oldsymbol{u} - oldsymbol{v}|}{\mu_c}$$





## **Particle dynamic time scale estimate 3)**



(from Crowe, Sommerfeld, Tsuji, Multiphase flows with droplets and particles, CRC press 1997)



## Particle dynamic time scale estimate 4)

**Small Reynolds number: Stokes flow** 

 $c_D = rac{24}{\mathrm{Re_{rel}}}$ 

• gives

$$rac{doldsymbol{v}}{dt}=rac{1}{ au_{oldsymbol{v}}}(oldsymbol{u}-oldsymbol{v})$$

• With

$$\tau_v = \frac{D^2 \rho_d}{18\mu_c} = \frac{D^2}{18\nu_c} \frac{\rho_d}{\rho_c}$$

Large Reynolds number:

 $c_D \approx 0.45$ 

• gives

$$rac{doldsymbol{v}}{dt} = rac{1}{ au_{vl}}(oldsymbol{u} - oldsymbol{v})$$

• With

$$au_{vl} = rac{8}{3} rac{D}{|oldsymbol{u}-oldsymbol{v}|} rac{
ho_d}{
ho_c}$$

 $\tau_v$  is the characteristic time to reach equilibrium of velocities  $v = u(1 - e^{-t/\tau_v})$ 



## **Particle dynamic time scale estimate 5)**

- ➤ response time of 100 microns water droplet in Stokes regimes air flow : 30 ms
- $\blacktriangleright$  response time of 1mm rain droplet at relavite velocity of 10 m/s : 0.3 s



## Stokes number 1)

#### **Stokes number definition**

Stokes number is the ratio particle dynamic time scale over characteristic fluid flow time scale :

$$\mathrm{St} = rac{ au_v}{ au_F}$$

- → If  $s_{t_v} << 1$  The particle relaxation time is very low and the droplet velocity will be very close to the gaseous phase.
- > If  $s_{t_v} >> 1$  The particles are not affected by the gaseous phase.
- ➤ If  $St_v \cong 1$  In the case of unsteady flow, the particles will be located at the periphery of the vortices (mixing layer configuration for example), some of them will be centrifuged. In this case the expansion will be maximum.

## **Stokes number 2)**



From Soteriou et al, AIAA paper 1997



## Stokes number 3)



Preferential concentration : 2d slices at the same time

## **Particle thermal relaxation time 1)**

➤ Heat flux between particle and fluid :

$$\dot{q}'' = \lambda_c \left. \frac{dT_G}{dr} \right|_{\text{surface}} = k(T_{\infty} - T_d)$$

> Non-dimensional heat transfer coefficient definition : Nussel number  $Nu = \frac{kD}{\lambda_c}$ 

Conductive heat transfer

$$\dot{Q} = \dot{q}'' \pi D^2 = \mathrm{Nu} \pi D \lambda_c (T_{\infty} - T_d)$$

➤ Thermal balance gives:

$$mc_{pd}rac{dT_d}{dt} = \dot{Q}$$
 $\downarrow$ 
 $\frac{dT_d}{dt} = rac{6\mathrm{Nu}\lambda_{\mathrm{c}}}{
ho_d D^2 c_{pd}}(T_{\infty} - T_d)$ 



## **Particle thermal relaxation time 2)**

Small Reynolds number: Nu = 2 gives  $\tau_T = \frac{\rho_d c_{pd} D^2}{12\lambda_c}$ 

With Prandtl number defined as

$$\Pr = rac{\mu_c c_{pc}}{\lambda_c}$$

Time scale ratio

$$rac{ au_v}{ au_T} = rac{2}{3} rac{1}{\Pr} rac{c_{pc}}{c_{pd}}$$

Thermal response time of 100 microns water droplet in ambiant air: 145 ms  $> \tau_v$ 

## **Dilute versus dense flow**

- Dilute flow : particle motion controled by carrier fluid drag and lift force
- Dense flow : particle motion controled by collisions
- $\blacktriangleright$  How to check ?

 $au_v/ au_c < 1$  Dilute  $au_v/ au_c > 1$  Dilute

> Collision timescale :  $\tau_c = \frac{1}{n\pi D^2 v_r}$ 

$$\frac{\tau_v}{\tau_c} = \frac{n\pi\rho_d D^4 v_r}{18\mu_c} = \frac{\overline{\rho_d} D v_r}{3\mu_c}$$

➤ How should we define the relative velocity ?



(from Crowe, Sommerfeld, Tsuji, **Multiphase flows with droplets and particles,** CRC press 1997)



## Particle-fluid interaction : particle equation of motion

- > Assuptions:
  - isolated particle
  - uniform far fied carrier fluid velocity
  - particle diameter lesser than smallest fluid lenght scale (Kolmogorov scale)
  - no evaporation or condensation
  - spherical particle
  - incompressible carrier fluid





## **Particle-fluid interaction : drag force**

Steady-state drag force

$$\boldsymbol{F}_D = \frac{1}{2} \rho_c C_D A |\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}| (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v})$$

- Assumptions:
  - uniform pressure field
  - no acceleration of (u v)
- Drag coefficient  $C_D$  depends on
  - particle shape and orientation
  - Re, Ma, turbulence
  - etc.



## **Particle-fluid interaction : drag coefficient**

#### Drag coefficient :

- assuming particle is non-rotating solid sphere in uniform free stream flow

$$C_D = \frac{24}{Re} f$$

• Re < 1: f=1 (Stokes flow)

• Re < 800 :  $f = 1 + 0.15 Re^{0.687}$  (Schiller et Neumann)

•  $\operatorname{Re} < 2x10^5$   $f = 1 + 0.15 \operatorname{Re}^{0.687} + 0.0175 \operatorname{Re} /(1 + 42500 \operatorname{Re}^{-1.16})$  (Clift)



### **Particle-fluid interaction : drag coefficient**



THE FRENCH AEROSPACE LAB

50

### Particle-fluid interaction : pressure gradientbuoyancy

**Pressure force**: buoyancy

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{p}} = \int -p\boldsymbol{n}\,d\boldsymbol{s} = \int_{CV} \nabla p\,\boldsymbol{d}\boldsymbol{v}$$

➤ Assuming pressure gradient constant over the particle :

$$F_{p} = -\nabla p V_{d} = -\rho_{c} V_{d} g$$



Particle equation of motion is :

$$\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = \frac{f}{\tau_v} (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) + \mathbf{g}(1 - \frac{\rho_c}{\rho_d})$$



## **Particle-fluid interaction : shear stress**

Shear stress in carrier fluid

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{\tau}} = \int_{CS} -\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{n} \, ds = \int_{CV} -\nabla \boldsymbol{\tau} \, dv$$



➤ Assuming constant shear in carrier fluid :

$$F_{\tau} = -\nabla \tau V_d$$



## Particle-fluid interaction : unsteady forces-inviscid effect

> Arising from relative velocity acceleration (u-v) added mass or virtual mass force :

Added mass
Accelerating a body in fluid
moving fluid around
$$\phi = v(t) \frac{R^3}{2r^2} \cos \theta \qquad \int -pnds = -\frac{2}{3}\rho_c \pi \frac{D^3}{8} \frac{dv}{dt}$$
consider a solid sphere moving at v(t) in an inviscid fluid at rest :
$$F_{vm} = -\frac{1}{2}\rho_c V_c \frac{dv}{dt} \implies \rho_d V_d \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{2}\rho_c V_c \frac{dv}{dt} + \sum other forces$$

THE FRENCH AEROSPACE LAB

## Particle-fluid interaction : unsteady forces-inviscid

> When fluid velocity of carrier flow is taken into account

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{v}m} = \frac{1}{2} \rho_c V_c \left( \frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} - \frac{d\boldsymbol{v}}{dt} \right)$$

➤ For non spherical particle :

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{v}\boldsymbol{m}} = C_{\boldsymbol{v}\boldsymbol{m}}\rho_{c}V_{c}\left(\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} - \frac{d\boldsymbol{v}}{dt}\right)$$

Added mass or virtual mass coefficient  $C_{vm}=1/2$  for spherical particle

## Particle-fluid interaction : unsteady force – viscous effect

- **Basset force**, due to delay in boundary layer development around the particle:
  - linked to the first Stokes problem : impulsively accelerated flat plate

continuously accelerated flat plate:

$$\tau = \sqrt{\mu_c \rho_c / \pi} \int_0^t \frac{du/dt'}{\sqrt{t - t'}} dt'$$



ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

## Particle-fluid interaction : unsteady force – viscous effect

> Applying the same approach for the impulsive start of fluid around a sphere gives:

$$\boldsymbol{F}_B = \frac{3}{2} D^2 \sqrt{\pi \mu_c \rho_c} \int_0^t \frac{(\dot{\boldsymbol{u}} - \dot{\boldsymbol{v}})}{\sqrt{t - t'}} dt' \qquad \dot{\boldsymbol{u}} = \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} \qquad \dot{\boldsymbol{v}} = \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}$$



### **Particle-fluid interaction : Basset Boussinesq Oseen equation 1)**

- Putting all together : steady state drag + pressure force + shear stress force + unsteady forces + body forces
- Assumptions: spherical particles, neglect internal particle motion, Mach number effect:

$$m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = 3\pi f \mu_c D(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) + V_d (-\boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}) + \frac{\rho_c V_d}{2} \left(\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} - \frac{d\boldsymbol{v}}{dt}\right)$$
$$+ \frac{3}{2} D^2 \sqrt{\pi \mu_c \rho_c} \int_0^t \frac{\dot{\boldsymbol{u}} - \dot{\boldsymbol{v}}}{\sqrt{t - \tau}} d\tau + m\boldsymbol{g}$$



## Particle-fluid interaction : Basset Boussinesq Oseen equation 2)

➤ Using Navier-Stokes equations for the carrier fluid :

$$\rho_c \, \frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla}p + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{g}\rho_c$$

 $\succ$  One get :

$$\left(1+\frac{1}{2}\frac{\rho_c}{\rho_d}\right)\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = \frac{f}{\tau_v}\left(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}\right) + \frac{3}{2}\frac{\rho_c}{\rho_d}\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} + \boldsymbol{g}\left(1-\frac{\rho_c}{\rho_d}\right) + \sqrt{\frac{9}{2\pi}\frac{\rho_c}{\rho_d}\frac{1}{\tau_v}}\int_0^t \frac{\dot{\boldsymbol{u}}-\dot{\boldsymbol{v}}}{\sqrt{t-\tau}}d\tau$$

> For 
$$\frac{\rho_c}{\rho_d} \ll 1 \Longrightarrow \frac{dv}{dt} = \frac{f}{\tau_v}(u-v) + g$$



## **Particle-fluid interaction : other forces**

#### ➤ Lift forces:

➤ For low Reynolds number : Saffman force

$$\operatorname{Re}_G = \frac{D^2}{\nu_c} \frac{du}{dy}$$



$$\operatorname{Re} << 1 \qquad \operatorname{Re}_G << 1 \qquad \operatorname{Re} << \sqrt{\operatorname{Re}_G}$$
$$\boldsymbol{F}_{Saff} = 1.61 \mu_c D | \boldsymbol{u} - \boldsymbol{v} | \sqrt{\operatorname{Re}_G}$$

> Higher Reynolds numbers: Re = O(1) Magnus force

$$oldsymbol{F}_{Mag} = rac{\pi}{8} D^3 
ho_c \left[ \left( rac{1}{2} 
abla imes oldsymbol{u} - oldsymbol{\omega}_d 
ight) imes (oldsymbol{u} - oldsymbol{v}) 
ight]$$





## Chapter IV: Different approaches for two phase dispersed flows numerical simulation



retour sur innovation

### **Typical scales and order of magnitude**

Liquid density  $\rho_l >>$  Gas density  $\rho_g => \alpha_l << 1$ , for mass loading close to 1 or lower than 1.

•Liquid volume fraction  $\alpha_l$ : from 10<sup>-6</sup> (very dilute spray) to 10<sup>-2</sup> (very dense spray)

•**Droplet diameter :** from 0.1  $\mu$ m to 200  $\mu$ m Typical size in most applications : **D** = 10  $\mu$ m

Droplet number (n = α<sub>l</sub> / V<sup>3</sup>): from 10<sup>3</sup> droplets (very dilute spray) to 10<sup>7</sup> droplets (very dense spray) per cubic centimeter.
 Impossible (and useless !) to « track » each droplet separately



## Les différents niveaux possibles de description

#### Exact microscopic description

Large dynamical system for the « solid motion » of the N particles+ Navier-Stokes equations for the continuous phase + no-slip boundary conditions at the interface between the two phases.

Simplified microscopic description

 $D_p << L, \ \alpha_0 << 1$ 

Large simplified dynamical system for N pointwise particles + Navier-Stokes equations for the continuous phase with source terms to account for the effect of the particulate phase

Statistical description of the dispersed phase

 $\sim \infty$ 

Kinetic equation for the probability density function f(t,x,v,u,r,...) + Navier-Stokes equations with source terms for the fluid phase.

**Closure assumption on probability density** 

#### Fluid description

**function** *f*(*t*,*x*,*v*,*r*,....)

System of conservation equations for some moments (low order moments) of the spray *p.d.f.*  $(n_p, \alpha_p, \rho_p, \alpha_p, \rho_p, V_p, \alpha_p, \rho_p, E_p, ...)$ + Navier-Stokes equations with source terms for the fluid phase.

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

## Exemple de simulation directe de particules résolues (taille finie)-écoulement dense

#### Lit fluidisé : 2100 particules (12 points/ diamètre) I2M,IMFT,ONERA





## Exemple de simulation directe de particules résolues (taille finie)-écoulement dilué

#### Interaction particule turbulence (12 points/ diamétre) I2M,IMFT,ONERA

- > Diamètre des particules: $10\eta_k$
- Turbulence stationnaire
- Prise en compte des collisions





# Exemple de simulation directe de particules ponctuelles : DPS-DNS

Interaction particule turbulence: IMFT











## Example de simulation particules ponctuelles: LES-DPS





## **Example de simulation particules ponctuelles: LES-DPS banc mercato**



ONERA-DMAE(thèse Bruyat)



## **Exemple de simulation RANS + particules (pdf)**

#### Calcul LPP





## **Exemple de simulation RANS +particules (pdf)**

Calcul allumage banc mercato : ( thèse Linassier )





## **Numerical Point Of View**

#### HYBRID MODEL :

Kinetic equation for the particulate phase probability density function f(t,x,v,r,...) coupled with the Navier-Stokes equations with source terms for the fluid phase.

## h, N, ∆t

#### EULERIAN / LAGRANGIAN NUMERICAL METHOD

Stochastic particle method for the particulate phase (kinetic equation) coupled with a

Finite volume method for the continuous phase (Navier-Stokes equations)

#### TWO-FLUID MODEL

Set of conservation equations for some moments of the spray p.d.f.  $(n_p, \alpha_p \rho_p, \alpha_p \rho_p V_p, ...)$ coupled with the Navier-Stokes equations with source terms for the fluid phase.

 $h, \Delta t$ 

#### *EULERIAN / EULERIAN NUMERICAL METHOD*

Finite volume method for the whole system of conservation equations



## For the gas phase






# **Comparison DNS/LES/RANS**

Comparison DNS/LES/RANS		
Approaches	Advantages	Disadvanta ges
RANS	Low computation cost and low resolution	Mean aerodynamic fields only
LES	Unsteady computation producing a real behavior of the large scales of the turbulence. Application to the computation of the unsteady reactive flow inside a combustion chamber	Only one part of the spectrum is computed, high computation cost
DNS	No model	Very high computational cost, application only on simple geometries and low Re flows.



## **Euler-Euler approach for two phase flows**

#### Advantages and disadvantages of this approach

- The particle phase is treated as a continuous phase

#### Advantages:

- Easy elaboration of the code, the computations for the two phases are identical
- The volume occupied by the dispersed phase is taken into account in the equations.
- The action of the dispersed phase on the gas phase . (Two Way Coupling) is "naturally" taken into account.

#### **Disadvantages:**

- The integration of the physical models due to the presence of the dispersed phase is very difficult: droplet evaporation, condensation, atomisation, droplet-wall interaction, secondary break up, collision....
- Difficulties to considered a polydisperse size distribution for the dispersed phase, that is a main disadvantage for this method, in different burners at the exit of injection devices the spray is polydisperse.

The cost can become high by considering a polydisperse size distribution.



#### **Euler-Lagrange approach for two phase flows**

#### Advantages and disadvantages:

#### Advantages

- The using is very simple (some problems can be encountered for the Two Way coupling depending of the importance of sources terms.
- The integration of the physical models is very easy, it is for this reason that this approach is often used to simulate the reactive two phase flows inside a combustion chamber of air-breathing or rocket engines
- Different injection points can be chosen with for each point different size classes (example : to compute a spray, 10 injection points are generally chosen with 5 size per point, each class representing a droplet package. Each package can be injected with the one frequency. The droplet size, velocity, temperature and frequency are provided by experiment by using optical techniques such as: Malvern, PDPA (for the droplet size and velocity), LDA (for the aerodynamic field), rainbow and LIF (for the droplet temperature)...

#### **Disadvantages:**

- The computation cost can become high

The volume occupied by the particles is not taken into account, inducing some problems for dense two flow computations. However, to consider a four way coupling some empirical correlation can be used to treat the droplet-droplet interactions. Some correlation have been derived by ONERA to correct the evolution of the drag coefficient, the evaporation rate and the burning rates with the droplet spacing (ratio between the mean distance between the droplets and the mean size of the droplets.

### **Equation du mouvement 1)**

$$\frac{d \mathbf{x}_{p}}{d t} = \mathbf{v}_{p}, \quad \frac{d \mathbf{v}_{p}}{d t} = \frac{\mathbf{F}_{p}}{m_{p}}$$

$$\mathbf{F}_{p} = \underbrace{\frac{1}{2} \pi \rho_{g} r_{p}^{2} C_{D} \| \mathbf{V}_{g}(t, \mathbf{x}_{p}) - \mathbf{v}_{p} \| (\mathbf{V}_{g}(t, \mathbf{x}_{p}) - \mathbf{v}_{p})}_{\text{force de traînée}} + \underbrace{\frac{4}{3} \pi \rho_{p} r_{p}^{3} \mathbf{g}}_{\text{force de gravité}}$$

+ Forces d'inertie si repère non galiléen

• Le coefficient de traînée  $C_D$  est fonction du nombre de Reynolds particulaire  $Re_p$  et du nombre de Mach particulaire  $M_p$ .

• Dans l'expression de la force de traînée,  $V_g$  désigne la *vitesse instantannée* du gaz au point où se trouve la particule  $\rightarrow$  nécessité d'un modèle si écoulement turbulent et approche RANS.

# **Equation du mouvement 2)**

L'expression du coefficient de traînée est donné par une relation semi-empirique généralisant la formule de Stokes  $C_D = 24/Re_p$ , valable uniquement pour les très petites gouttes. Loi de Shiller et Naumann (1933)

$$\begin{cases} C_D = \frac{24}{\text{Re}_p} (1 + 0.15 \text{ Re}_p^{0.687}) \text{ si } \text{Re}_p < 1000 \\ C_D = 0.445 \text{ si } \text{Re}_p > 1000 \end{cases} \text{ avec}$$

$$Re_{p} = \frac{2\rho_{g} r_{p} \left\| \mathbf{V}_{g}(t, x_{p}) - \mathbf{v}_{p} \right\|}{\mu_{g}}$$

Pour écoulements fortement compressibles : prise en compte d'une correction tenant compte de l'influence du nombre de Mach M<sub>p</sub>

## **Equation du mouvement 3)**

Temps de réponse dynamique d'une particule :  $\tau_p$ 





# Notion de vitesse vue

En général, le champ de vitesse instantanée du gaz n'est pas connu. On connaît uniquement (par résolution numérique des équations de Navier-Stokes moyennées) :

• le champ de vitesse moyenne :  $U_g(t,x)$ 

• deux grandeurs moyennes caractérisant des propriétés statistiques de la turbulence; en général ce sont l'énergie cinétique moyenne de la turbulence  $k_g(t,x)$  et son taux de dissipation moyen  $\varepsilon_g(t,x)$ .

A partir de ces grandeurs, il est nécessaire de se donner un modèle permettant d'estimer la vitesse turbulente  $\mathbf{u}_{g'}(t,\mathbf{x}_{p}(t))$  « vue » par une goutte le long de sa trajectoire.

# Rappel de THIS (Turbulence Homogène Isotrope Stationnaire)

Hypothèses sur les propriétés statistiques du champ turbulent u'g:

• corrélations spatiales. 
$$\langle u'_{g,i}(t,x)u'_{g,j}(t,y)\rangle = \mathbf{Q}_{ij}(\mathbf{r}) = \sigma_g^2 \left[g(r)\delta_{ij} + (f(r) - g(r))\xi_i\xi_j\right]$$
  
avec  $\mathbf{r} = (x - y) = r\mathbf{\xi}$ 

f et g sont les fonctions d'auto-corrélation spatiales, longitudinale et transversale.

• corrélation temporelles. - point de vue eulérien :  $\langle u'_{g,i}(t,x)u'_{g,j}(s,x)\rangle = \mathbf{R}^{E}_{ij}(t-s) = \sigma_{g}^{2} h_{e}(t-s) \,\delta_{ij} = \sigma_{g}^{2} e^{\frac{t-s}{\tau_{E}}} \,\delta_{ij}$ 

- point de vue lagrangien : 
$$\langle u'_{g,i}(t, x(t, x_0))u'_{g,j}(s, x(s, x_0)) \rangle = \mathbf{R}_{ij}^L(t-s) = \sigma_g^2 h_l(t-s) \delta_{ij} = \sigma_g^2 e^{\frac{t-s}{\tau_L}} \delta_{ij}$$

Sachant que (résultat expérimental)  $\tau_E \approx \tau_L$ , on supposera que le long de la trajectoire d'une particule inertielle, on a également :

$$\langle u'_{g,i}(t, x_p(t, x_{p0}))u'_{g,j}(s, x_p(x, x_{p0})) \rangle = \sigma_g^2 e^{\frac{t-s}{\tau_g}} \delta_{ij}$$
 avec  $\tau_g = \tau_L$ 



# Diffusion turbulente de particules fluides dans une THIS 1)

Importance du tenseur d'auto-corrélation lagrangien pour la diffusion d'un traceur passif (d'après l'analyse de Taylor, Proc. Of London Math. Soc., 1921)

$$\frac{dx_i}{dt}(t) = v_i(t) \quad ; \quad x_i(0) = 0 \qquad x_i(t) = \int_0^t v_i(s) ds$$

$$< x_i(t)^2 >= \iint_D \left\langle v_i(t_1) v_i(t_2) \right\rangle dt_1 dt_2 = \iint_{D'} \left\langle v_i(t_1) v_i(t_1 + \tau) \right\rangle dt_1 d\tau = \left\langle v_i^2 \right\rangle \iint_{D'} R_{ii}^L(\tau) dt_1 d\tau$$

$$R_{ii}^L(\tau) = \left\langle v_i(t) v_i(t + \tau) \right\rangle / \left\langle v_i^2(t) \right\rangle = \left\langle v_i(t) v_i(t + \tau) \right\rangle / \left\langle v_i^2 \right\rangle$$

$$< x_i(t)^2 >= \left\langle v_i^2 \right\rangle \iint_{D'} R_{ii}^L(\tau) dt_1 d\tau = 2t \left\langle v_i^2 \right\rangle \int_0^t (1 - \tau/t) R_{ii}^L(\tau) d\tau$$

$$\sigma^{2}(t) = \langle x_{i}(t)^{2} \rangle \approx 2t \langle v_{i}^{2} \rangle \int_{0}^{t} R_{ii}^{L}(\tau) d\tau = 2t \langle v_{i}^{2} \rangle \tau_{L} \qquad \text{Coefficient de diffusion turbulente}$$

$$\sigma^{2}(t) = \langle x_{i}(t)^{2} \rangle \approx 2 \langle v_{i}^{2} \rangle \int_{0}^{t} (t-z) R_{ii}^{L}(z) dz = t^{2} \langle v_{i}^{2} \rangle \quad (\text{pour } t \ll \tau_{L})$$

# Diffusion turbulente de particules fluides dans une THIS 2)



(Pope Turbulent flows 2002)

ONERA

# Modèle de Langevin pour la dispersion de particules fluides dans une THIS 1)

Modèle stochastique développé au départ par Langevin pour la vitesse d'une particule microcospique dans un mouvement brownien

$$\mathbf{d}\mathbf{u}_{g}(t) = -\frac{1}{\tau_{g}}\mathbf{u}_{g}(t)dt + \sqrt{\frac{2\sigma_{g}^{2}}{\tau_{g}}}\mathbf{d}\mathbf{W}(t)$$

$$\mathbf{u}_{g}(t + \Delta t) = \mathbf{u}_{g}(t) - \frac{1}{\tau_{g}}\mathbf{u}_{g}(t)\Delta t + \sqrt{\frac{2\sigma_{g}^{2}\Delta t}{\tau_{g}}}\xi(t)$$

$$\mathbf{u}_{g}(t + \Delta t) = \mathbf{u}_{g}(t) - \frac{1}{\tau_{g}}\mathbf{u}_{g}(t)\Delta t + \sqrt{\frac{2\sigma_{g}^{2}\Delta t}{\tau_{g}}}\xi(t)$$
Partie déterministe qui relaxe vers 0 qd t  $\rightarrow \infty$  Terme de diffusion turbulente d'écart type  $\sigma\sqrt{2dt/\tau_{g}}$ 

# Modèle de Langevin pour la dispersion de particules fluides dans une THIS 2)



Fig. 12.7. The Lagrangian velocity autocorrelation function. Line, Langevin model  $\rho(s) = \exp(-s/T_L)$ ; solid symbols, experimental data of Sato and Yamamoto (1987)  $\triangleright$ ,  $R_{\lambda} = 46$  and  $\triangleleft$ ,  $R_{\lambda} = 66$ ; open symbols, DNS data of Yeung and Pope (1989),  $R_{\lambda} = 90$ .

From Pope :Turbulent flows

ONERA

# Modèle de Langevin pour la dispersion de particules fluides dans une THIS 3)



Fig. 12.11. Samples of fluid-particle paths given by the Langevin model, shown for (a) moderate times and (b) long times. The dashed lines show  $\pm \sigma_X(t)$ .

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

#### From Pope :Turbulent flows

Equations du mouvement d'une particule.

On pose :  $\mathbf{u}_{p}(t) = \mathbf{u'}_{g}(t, \mathbf{x}_{p}(t, \mathbf{x}_{p0}))$ 



Par construction, le processus  $\mathbf{u}_{p}(t)$  ainsi défini vérifie :

$$\left\langle u_{p,i}(\mathbf{t})u_{p,j}(\mathbf{s})\right\rangle = \mathbf{R}_{ij}^{L}(t-s) = \sigma_{g}^{2} e^{-\frac{t-s}{\tau_{g}}} \delta_{ij}$$

Références: Shuen, Chen et Faeth (1983), Sawford (1984), Pope (1985), Simonin, Deutsch et Minier (1993), Minier-Peirano (2001), etc.

Equation vérifiée par la densité de probabilité jointe  $f_{pg}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{u})$ :

$$\frac{\partial f_{pg}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \mathbf{v} f_{pg} \right) + \nabla_{\mathbf{v}} \left( \frac{\mathbf{u} - \mathbf{v}}{\tau_p} f_{pg} \right) - \nabla_{\mathbf{u}} \left( \frac{\mathbf{u}}{\tau_g} f_{pg} \right) - \Delta_{\mathbf{u}} \left( \frac{\sigma_g^2}{\tau_g} f_{pg} \right) = 0$$

#### Forme adimensionnée de l'équation.

On pose :  $\mathbf{t} = \mathbf{T} \mathbf{t}'$ ;  $\mathbf{x} = \mathbf{L} \mathbf{x}'$ ;  $\mathbf{v} = \mathbf{L} / \mathbf{T} \mathbf{v}'$ ;  $\mathbf{u} = \mathbf{L} / \mathbf{T} \mathbf{u}'$ ;  $\sigma_g = \mathbf{L} / \mathbf{T} \sigma_g'$ ;  $\mathbf{K}_p = \tau_p / \mathbf{T}$ ;  $\mathbf{K}_g = \tau_g / \mathbf{T}$ ;  $\mathbf{S}\mathbf{t} = \tau_p / \tau_g$  (Stokes number)  $\frac{\partial f'_{pg}}{\partial t'} + \nabla_{\mathbf{x}'} (\mathbf{v}' f'_{pg}) + \frac{1}{K_p} \nabla_{\mathbf{v}'} ((\mathbf{u}' - \mathbf{v}') f'_{pg}) - \frac{1}{K_g} \left[ \nabla_{\mathbf{u}'} (\mathbf{u}' f'_{pg}) + \sigma_g'^2 \Delta_{\mathbf{u}'} (f'_{pg}) \right] = 0$ 



1<sup>ère</sup> limite : 
$$K_p$$
 fixé ( $T \approx \tau_p$ ) ;  $K_g \rightarrow 0$  (càd St  $\rightarrow \infty$ )

On a (formellement) :

où

$$f_{pg}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{u}) = M_{\sigma_g}(\mathbf{u}) \left[ f_p(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) - \frac{1}{St} \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_p(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) \right] + O(\frac{1}{St^2})$$

$$M_{\sigma_g}(\mathbf{u}) = \frac{1}{\left(2\pi\sigma_g^2\right)^{d/2}} \exp\left(\frac{-\mathbf{u}^2}{2\sigma_g^2}\right)$$

et où  $f_p$  est solution de l'équation réduite (de type Fokker – Planck) :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \mathbf{v} f_p \right) + \nabla_{\mathbf{v}} \left( -\frac{\mathbf{v}}{\tau_p} f_p - D_{\mathbf{v}} \nabla_{\mathbf{v}} f_p \right) = 0 \qquad \text{avec}: \qquad D_{\mathbf{v}} = \frac{\sigma_g^2 \tau_g}{\tau_p^2} = O(\frac{1}{St})$$



2<sup>ème</sup> limite :  $K_g$  fixé (T  $\approx \tau_g$ ) ;  $K_p \rightarrow 0$  (càd St  $\rightarrow 0$ )

On a (formellement) :

$$f_{pg}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{u}) = \frac{1}{\left(2\pi S t \sigma_g^2\right)^{d/2}} \exp\left(\frac{-\left|\mathbf{v} - \mathbf{u}\right|^2}{2 S t \sigma_g^2}\right) f_g(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) + O(\sqrt{St})$$

où  $f_p$  est solution de l'équation :

$$\frac{\partial f_g}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \mathbf{u} f_g \right) + \nabla_{\mathbf{u}} \left( -\frac{\mathbf{u}}{\tau_g} f_g - D_{\mathbf{u}} \nabla_{\mathbf{u}} f_g \right) = 0 \qquad \text{avec}: \qquad D_{\mathbf{u}} = \frac{\sigma_g^2}{\tau_g}$$

Idée : on pose  $\mathbf{w} = (\mathbf{v}-\mathbf{u})/St^{1/2}$ , et on écrit l'équation vérifiée par

 $h_{pg}(\mathbf{t}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{u}) = St^{d/2} f_{pg}(\mathbf{t}, \mathbf{x}, \mathbf{u} + S^{1/2} \mathbf{w}, \mathbf{u}) \Leftrightarrow f_{pg}(\mathbf{t}, \mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{u}) = St^{-d/2} h_{pg}(\mathbf{t}, \mathbf{x}, (\mathbf{v}-\mathbf{u})/St^{1/2}, \mathbf{u})$  $\Rightarrow \text{Élimination de la singularité.}$ 

ONERA

E FRENCH AEROSPACE LAB

 $\Rightarrow$  Puis développement asymptotique à *l'ordre 0 uniquement* en fonction de S.

 $3^{\text{ème}}$  limite : St fixé,  $K = \max(K_p, K_g) \rightarrow 0$  (T >>  $\max(\tau_g, \tau_p)$ )

On a (formellement) :

$$f_{pg}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{u}) = M_{S, \sigma_g}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \Big[ n_p(t, \mathbf{x}) - \tau_g \big[ (2 + St) \mathbf{v} - \mathbf{u} \big] \nabla_{\mathbf{x}} n_p(t, \mathbf{x}) \Big] + O(K^2)$$

où

$$M_{St,\sigma_g}(\mathbf{v},\mathbf{u}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \det(\mathbf{\Sigma})} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v},\mathbf{u})^{\mathbf{T}} \mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{v},\mathbf{u})}{2}\right)$$

avec 
$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_g^2 & \boldsymbol{\sigma}_g^2 \\ 1 + St & 1 + St \\ \boldsymbol{\sigma}_g^2 \\ 1 + St & \boldsymbol{\sigma}_g^2 & \mathbf{Id} \end{pmatrix}$$

 $\left|\mathbf{v}_{p,i}\right| \approx \frac{\sigma_g}{\sqrt{1+St}}$ 

ONERA

E FRENCH AEROSPACE LAB

et où  $n_p$  est solution de l'équation de diffusion:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} - \nabla_{\mathbf{x}} (D \nabla_{\mathbf{x}} n_p) = 0 \qquad \text{avec} \qquad \boxed{D} =$$

 $\left\langle \mathbf{v}_{p} \otimes \mathbf{v}_{p} \right\rangle = \frac{\sigma_{g}^{2}}{1 + St} \mathbf{Id}$ 

Preuve : cas similaire à celui de la limite 1 avec opérateur A(f) plus complexe faisant intervenir les deux variables **v** et **u**. Unicité de la distribution d'équilibre plus complexe à prouver. Remarques :

- *D* est indépendant de  $\tau_p$  !
- A l'équilibre, on a :

• Vitesse relative moyenne d'une particule dans un champ de forces uniforme

• Influence de la "vitesse de dérive" sur le temps d'auto-corrélation lagrangien Si  $|\mathbf{v_d}| \rightarrow \infty$ , la particule "voit" un champ turbulent figé  $\rightarrow$  le temps d'autocorrélation  $\tau_g^*$  de la turbulence le long de sa trajectoire n'est fonction que de  $|\mathbf{v_d}|$ et de l'échelle d'auto-corrélation spatiale de la turbulence  $\Lambda$ . Typiquement :

Si 
$$|\mathbf{v}_{\mathbf{d}}| \rightarrow \infty$$
,  $\tau_{g}^{*} \approx \frac{\Lambda}{|\mathbf{v}_{\mathbf{d}}|}$ 



Modèle phénoménologique de Csanady (1/2)

Dans une THIS, on a : 
$$\left\langle \left( u'_{g,i}(t,\mathbf{x})u'_{g,j}(t,\mathbf{x}+\mathbf{r}) \right\rangle = \mathbf{Q}_{ij}(\mathbf{r}) = \sigma_g^2 \left[ g(r) \left( \delta_{ij} - \frac{r_i r_j}{r^2} \right) + f(r) \frac{r_i r_j}{r^2} \right] \right\rangle$$

Supposons :  $\mathbf{r} = (r, 0, 0)$ . On obtient alors :





Modèle phénoménologique de Csanady (2/2)

$$\left\langle u'_{g,i}(t, \mathbf{x}_{\mathbf{p}}(t, \mathbf{x}_{\mathbf{p}0})) u'_{g,j}(t+s, \mathbf{x}_{\mathbf{p}0}) \right\rangle = \mathbf{R}_{ij}^{\mathsf{L}}(s) = \sigma_g^2 \left[ \exp(-\frac{s}{\tau_{\perp}}) \left( \delta_{ij} - \zeta_i \zeta_j \right) + \exp(-\frac{s}{\tau_{//}}) \zeta_i \zeta_j \right]$$

avec



où

$$\beta_{//} = \frac{\sigma_g^2 \tau^L}{\Lambda_f} \qquad \qquad \beta_{\perp} = \frac{\sigma_g^2 \tau^L}{\Lambda_g} = 2\beta_{//}$$

Par construction le modèle est consistant pour  $v_d \rightarrow 0$  et  $v_d \rightarrow \infty$ .



Équations du mouvement d'une particule dans une THIS en présence d'un champ de forces uniforme.

On pose :  $\mathbf{u}_{p}(t) = \mathbf{u'}_{g}(t, \mathbf{x}_{p}(t, \mathbf{x}_{p0}))$ 



Sans dimension, mais fonction de l'inertie de la particule

avec 
$$\mathbf{G} = \frac{\tau_g}{\tau_\perp} (\mathbf{I}_d - \boldsymbol{\zeta} \otimes \boldsymbol{\zeta}) + \frac{\tau_g}{\tau_{\prime\prime}} \boldsymbol{\zeta} \otimes \boldsymbol{\zeta}$$

Par construction, le processus  $\mathbf{u}_{p}(t)$  ainsi défini vérifie :

$$\left\langle \mathbf{u}_{\mathbf{p}}(t)\mathbf{u}_{\mathbf{p}}(t+s)\right\rangle = \sigma_{g}^{2}\left[\exp(-\frac{s}{\tau_{\perp}})\left(\delta_{ij}-\zeta_{i}\zeta_{j}\right)+\exp(-\frac{s}{\tau_{\prime\prime}})\zeta_{i}\zeta_{j}\right]$$



#### Modèle de dispersion turbulente des particules 1)

Particle velocity :  $\mathbf{v}_{p}$ Instantaneous gas velocity :  $V_g = \overline{V}_g + v'_g$ u<sub>n</sub>(t  $\mathbf{u}_{\mathbf{p}}(\mathbf{t}_3)$  $\mathbf{v_p}(t_3)$  $\mathbf{v_p}(t_1)$  $\mathbf{u}_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}_{1})$ 

Let 
$$\mathbf{u}_{p}(t) = \mathbf{v}'_{g}(t, \mathbf{x}_{p}(t))$$

 $\mathbf{u}_{p}$  can be modelled by using a stochastic differential equation (Langevin Equation)

[Pope, An. Rev. of Fluid Mech., 1994]



$$\mathbf{d}\mathbf{u}_{p} = -\frac{\mathbf{u}_{p}}{\tau_{g}} dt + \sqrt{\frac{2 \sigma_{g}^{2}}{\tau_{g}}} \mathbf{d}\mathbf{W}_{t}$$

3d Brownian Motion

ONERA

#### Modèle de dispersion turbulente des particules 2)

Determination of the model parameters :  $\sigma_g$  and  $\tau_g$  $\sigma_g$  and  $\tau_g$  are supposed to be constant, it can be easily deduced from the La

If  $\sigma_g$  and  $\tau_g$  are supposed to be constant, it can be easily deduced from the Langevin equation that :

$$\begin{array}{ccc} if t \to +\infty , \\ < u_{p,i}(t)u_{p,j}(t) > & \to \sigma_g^2 \,\delta_{ij} \end{array} \begin{array}{c} if t \to +\infty , \\ R_{ij}(t,s) = \frac{\langle u_{p,i}(t+s)u_{p,j}(t) \rangle}{\sqrt{\langle u_{p,i}(t)^2 \rangle}\sqrt{\langle u_{p,j}(t+s)^2 \rangle}} & \to \exp(\frac{-s}{\tau_g})\delta_{ij} \end{array}$$

It yields the following expression for  $\sigma_g$  and  $\tau_g$ :

$$\sigma_{g} = \sqrt{\frac{2k_{g}}{3}} \qquad \tau_{g} = C_{\tau} \frac{k_{g}}{\varepsilon_{g}}$$

 $\sigma_g$  = gas velocity variance.

 $\tau_g = \text{lagrangian time scale of the turbulence along the particle path } necessity for a model to compute C<sub>r</sub> > modèles « Langevin 1, 2 et 3 » de SPARTE.$ 

## Modèle de dispersion turbulente des particules 3)



96

## Modèlisation des échanges de chaleur 1)

#### Modélisation des échanges de chaleur en l'absence d'évaporation

*if*  $r >> r_p$ ,  $T = T_g$ Différence de température gaz / particule *if*  $r = r_p$ ,  $T = T_p$ ,

Solution analytique de l'équation de la chaleur sous l'hypothèse de symétrie sphérique

# Modèlisation des échanges de chaleur 2)

#### Modélisation des phénomènes d'évaporation/condensation (1/2)

On montre, en résolvant analytiquement l'équation de conservation de la masse de vapeur à l'extérieur de la particule (sous l'hypothèse de symétrie sphérique), que le taux de variation du rayon est solution de l'équation :



**Remarque :** on retrouve la loi dite du «  $D^2$  » si K<sub>ev</sub> est constante.

## Modèlisation des échanges de chaleur 3)

## Modélisation des phénomènes d'évaporation/condensation (2/2)

• Le nombre de Sherwood est l'analogue du nombre de Nusselt  $\rightarrow$  il permet de prendre en compte les effets convectifs sur le transfert de masse en surface de la goutte.

 $S_h = 2 + 0.57 \operatorname{Re}_p^{1/2} S_c^{1/3}$ 

(Ranz-Marshall correlation, Chem. Eng. Progress, 1952)

• La fraction molaire de vapeur à la surface de la goutte résulte de l'hypothèse d'équilibre thermodynamique à l'interface liquide / gaz  $\rightarrow$   $y_{vs}$  s'en déduit

$$x_{vs} = \frac{p_{sat}(T_p)}{p_g}$$

•Les propriétés thermophysiques de la phase gazeuse sont calculées en effectuant une moyenne entre les valeurs basées sur les conditions en surface de la goutte et celles à « l'infini »  $\rightarrow$  règle du 1/3-2/3.

### Modèlisation des échanges de chaleur 4)

# Modélisation des échanges de chaleur en présence de condensation / évaporation

L'expression du flux de chaleur net transmis par le gaz à la goutte doit être modifié pour tenir compte de :

• l'influence sur la couche limite thermique de l'effet de "soufflage" dû à la vaporisation de la goutte ;

• la prise en compte de la chaleur nécessaire à évaporer le liquide (chaleur latente).

$$\begin{cases} m_p c_l \frac{dT_p}{dt} = 2\pi r_p \lambda_g N u \frac{\ln\left(1 + B_T\right)}{B_T} \left(T_g - T_p\right) - \dot{m} L_v(T_p) \\ avec \qquad B_T = \left(1 + B_M\right)^{Le \frac{Cp_v}{Cp_g}} - 1 \end{cases}$$



# Modèlisation des échanges de chaleur 5)

## Modélisation des phénomènes de fusion / solidification (1/2)

Le modèle retenu dans SPARTE repose sur les hypothèses simplificatrices suivantes

- La température est uniforme dans la particule (modèle dit « de conduction infinie »)
- La fusion / solidification ne commence que lorsque la température de la particule a atteint la valeur de la température de fusion,  $T_f$ , à la pression considérée ;
- La température reste constante, égale à  $T_f$ , durant toute la durée du processus de fusion / solidification.



## Modèlisation des échanges de chaleur 6)

Modélisation des phénomènes de fusion / solidification (2/2)

Durant la phase de fusion / solidification, la fraction massique de solide dans la particule évolue selon l'équation :

$$m_p \frac{dy_s}{dt} = -\frac{\varphi_g}{L_f}$$

où  $\phi_g$  représente le flux de chaleur échangé avec la phase gazeuse :

$$\varphi_g = 2\pi r_p \lambda_g N u (T_p - T_g)$$



#### Modélisation des collisions de gouttes (1/7)

Régimes de collision



Modélisation des collisions de gouttes (2/7)





Modélisation des collisions de gouttes (3/7)

Résultats expérimentaux de C. Rabe (2008)





Modélisation des collisions de gouttes (4/7)

#### **Post-collisional properties**

Coalescence

$$\begin{cases} r' = \sqrt[3]{r^3} + r^{*3} \\ T' = \frac{r^3 T + r^{*3} T^{*}}{r^3 + r^{*3}} \\ \mathbf{v}' = \frac{r^3 \mathbf{v} + r^{*3} \mathbf{v}^{*}}{r^3 + r^{*3}} \\ \mathbf{u}' = \mathbf{u}^{*} = \mathbf{u} \end{cases}$$

mass conservation (if volume variations are neglected) + energy conservation (if kinetic and surface tension energy dissipation is neglected)

+ momentum conservation

Bouncing or Rebound

$$\begin{cases} r^{*'} = r^{*} ; r' = r \\ T^{*'} = T^{*}; T' = T \\ \mathbf{v}' = \mathbf{v} ; \mathbf{v}^{*'} = \mathbf{v}^{*} \\ \mathbf{u}' = \mathbf{u}^{*'} = \mathbf{u} = \mathbf{u}^{*} \end{cases}$$

Very simplified model (Satellite droplets not taken into account)



Modélisation des collisions de gouttes (5/7)

$$\sigma = \pi y_{c}^{2} = \pi (r^{2} + r^{*2}) E(r, r^{*2}, |\mathbf{v} - \mathbf{v}^{*}|)$$

# E is called "collision efficiency"

E takes into account the effect of very small scale hydrodynamic interactions between two approaching




#### Modélisation de la collision

Modélisation des collisions de gouttes (6/7)

#### Langmuir model (1948)



ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

**Remarque.** Dans SPARTE  $\rightarrow$  choix entre deux modèles : Langmuir et Blodgett ou Beard et Grover.

#### Modélisation de la collision

Modélisation des collisions de gouttes (7/7)

#### (DNS calculation, P. Février 2000)



Small droplets

Large droplets

For small droplets, the so-called « chaos assumption » is not justified at all.

 $f^{(2)} \neq f^{(1)} f_*^{(1)} \rightarrow$  Modèle de corrélation de vitesse dans SPARTE pour les écoulements turbulents traités avec une approche RANS.

Modélisation de la fragmentation (1/4)

Pour une goutte immobile par rapport au gaz, on a la relation de Laplace :

Pour une goutte en mouvement par rapport au gaz, on a :

A partir de la relation de Bernoulli, on obtient formellement :

On en déduit la condition caractérisant une forte

déformation de la goutte :

$$\frac{\Delta r_p}{r_p} \ge 1 \Leftrightarrow \frac{2\rho_g r_p \left| \mathbf{V}_g - \mathbf{v}_p \right|^2}{\sigma_l} \ge 8$$

$$\left| \Delta p \right| \approx 1/2\rho_g \left| \mathbf{V}_g - \mathbf{v}_p \right|^2 \approx \frac{2\sigma_l}{r_p^2} \left| \Delta r_p \right|$$



ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB



 $p_g \neq Cste$ 

Modélisation de la fragmentation (2/4)

$$We = \frac{2\rho_g |\mathbf{v}_p - \mathbf{u}_p - \overline{\mathbf{V}}_g|^2 r_p}{\sigma_l} Oh$$



Pictures of the different regimes for Oh < 0.1 (low viscosity effects) STRONG desintegration of the droplet => creation of a cloud of smaller droplets ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

Modélisation de la fragmentation (3/4)

#### **Breakup frequency :**

$$V_{bup}(\overline{\mathbf{V}}_{g}, \mathbf{v}, \mathbf{u}, r, \theta) = \frac{1}{\tau_{bup}(\overline{\mathbf{V}}_{g}, \mathbf{v}, \mathbf{u}, r, \theta)} = f(\text{We,Oh})$$

HE FRENCH AEROSPACE LAB

(model for  $\tau_{bup}$  based on empirical correlations, see for example Nigmatulin, 1991)

#### **Droplet size and velocity distribution after breakup :**



(model based on empirical correlations, see for example Wert, Int. Journal of Multiphase Flows, 1995 or Faeth & Hsiang, Int. Journal of Multiphase Flows, 1993) ONERA

#### Modélisation de la fragmentation (4/4)





#### Schmelz & Walzel experiment (Atomization and sprays, 2003)



Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (1/9)

Paroi froide  $\Leftrightarrow T_{paroi} < T_{eb}$ 

Schematic representation of a droplet impact on a cold wall



First possibility : *droplet deposition* 



Second possibility : *droplet splashing* 



Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (2/9)

After impact, there is a competition between two kind of forces :

• inertial forces due to the initial velocity of the droplet (normal to the wall) which tend to dislocate the droplet ;

• capillary forces which tend to avoid the fragmentation of the droplet ;

Viscous forces also play a important role since they contribute to dissipate the initial kinetic energy of the droplet.



Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (3/9) It is thus natural to introduce the two following dimensionless numbers :

• the Weber number that represents the ratio between the inertial forces and the capillary ones :



• the Reynolds number that represents the ratio between the inertial forces and the viscous ones :

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho_{\ell} D_b V_b}{\mu_{\ell}}$$



Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (4/9)

The simplest model for the limit between deposition and splashing modes reads :

$\int We < We_c \implies$	depsosition
$We > We_c \Rightarrow$	splashing

where We<sub>c</sub> is a decreasing function of the Reynolds number. From experimental data, it seems that We<sub>c</sub> can be approximated by an expression of the form :

 $We_{c} = W^{*} \operatorname{Re}^{-\alpha}$  d'où le critère :  $\begin{cases} WeRe^{\alpha} < We^{*} \Rightarrow dépot \\ WeRe^{\alpha} > We^{*} \Rightarrow éclaboussmenet \end{cases}$ 

que l'on peut également traduire par :

 $\begin{cases} K = We \ Oh^{-\beta} < K^* \Longrightarrow d\acute{e}p\acute{o}t \\ K = We \ Oh^{-\beta} > K^* \Longrightarrow \acute{e}claboussement \end{cases}$ 

where  $\beta$  and K\* have to be fitted to obtain the best agreement with the

measurements.	Auteur	Mundo,	Marengo &	Samenfin	Stow &
$Oh = \frac{\sqrt{We}}{\sqrt{We}} = \frac{\mu_l}{\sqrt{We}}$	K*	663	2074	1444	1320
Re $\sqrt{\rho_l D_b \sigma}$	β	0.4	0.4	0.33	0.36



Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (5/9)

Splashing mode : droplet size distribution after splashing

From the existing experimental data, the droplet size distribution of the reemitted droplets can be well fitted by a log-normal law :

$$P(D) = \frac{1}{\sqrt{2 \pi \sigma} D} \exp \left( \frac{-\left[ \ln \left( \frac{D}{D_m} \right)^2 \right]}{2 \sigma^2} \right)$$

where the mean diameter  $D_m$  and the standard deviation  $\sigma$  depend on  $D_0$  and K.

One has the following relation between  $D_m$  and the Sauter mean diameter  $D_{32}$  of the log-normal distribution of the resulting droplets :

$$D_m = D_{32} \exp\left(-\frac{5}{2}\sigma^2\right)$$

**Remark** :  $(D_{32})_a$  must be a decreasing function of K !

Collecting a lot of results coming from the litterature and from experiments performed at ONERA (using Laser techniques), the following correlation has been obtained for  $(D_{32})_a$ 

$$\frac{B_{32}}{D_b} = R_0 + R_1 \exp\left(-\frac{K}{\Delta R}\right)$$

Adjustable parameters

Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (6/9)

Splashing mode : droplet size distribution after splashing

The best fit with a large set of available experimental data (in 2006) yields the following values for the model parameters :



*Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (7/9)* Splashing mode : droplet velocity distribution after splashing



Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (8/9)

Splashing mode : droplet velocity distribution after splashing

Calcul de 
$$\left| \vec{v}_{a}'' \right| \xrightarrow{pdf} P(x) = \frac{b}{\theta} \left( \frac{x}{\theta} \right)^{b} \exp \left[ -\left( \frac{x}{\theta} \right)^{b} \right]$$
 avec  $x = \frac{\left| \vec{v}_{a}'' \right|}{\left| \vec{v}_{b} \cdot \vec{n} \right|}$ 

with b = 2.5,  $\theta = 0.35$ . The elevation angle  $\alpha$  is randomly chosen between 10° and 25° and the anzimut angle  $\beta$  is randomly chosen between 0° and 360° (for symmetry reason). The restitution coefficient *e* has been fixed to 0.8.



Simulation result (ONERA code)





. . . 1

Experiment,  $45^{\circ}$  impact with K = 1020

Simulation result (ONERA code)

THE FRENCH AEROSPACE LAB

References : this model is based on a synthesis of several works : Stanton et Rutland, 1996 - Mundo, Sommerfeld and Tropea, 1998 – Schmell, Rosskamp, Willmann, and Wittig, 1999.

121

*with K* = 4591

Modélisation de l'impact d'une goutte sur une paroi « froide » (9/9)

Splashing mode : deposited mass / reemitted mass



There are very large discrepancies between experimental data !

The correlation used in ONERA Lagrangian code has the following form for the total mass fraction of reemitted droplets  $\eta_s$ :

$$\eta_{s}(K) = \eta_{0} \left[ 1 - \left(\frac{K^{*}}{K}\right)^{\beta_{0}} \right]$$

with : 
$$\eta_0 = 0.75$$
 and  $\beta_0 = 1$ 



#### **Couplage entre phase**

Couplage avec l'écoulement gazeux (1/2)

General form of the gas phase equations

$$\begin{cases} \partial_{t} \rho_{g} + \nabla_{x} (\rho_{g} \mathbf{V}_{g}) = \mathbf{S}_{\rho} + \dots \\ \partial_{t} (\rho_{g} y_{vg}) + \nabla_{x} (\rho_{g} y_{vg} \mathbf{V}_{g}) - \nabla_{x} (\rho_{g} D_{vg} \nabla_{x} y_{vg}) = \mathbf{S}_{\rho} + \dots \\ \partial_{t} (\rho_{g} \mathbf{V}_{g}) + \nabla_{x} (\rho_{g} \mathbf{V}_{g} \otimes \mathbf{V}_{g}) + \nabla_{x} p_{g} + \dots = \mathbf{S}_{\rho V} + \dots \\ \partial_{t} (\rho_{g} E_{g}) + \nabla_{x} \left[ \rho_{g} (E_{g} + p_{g}) \mathbf{V}_{g} \right] + \dots = \mathbf{S}_{\rho E} + \dots \end{cases}$$

#### + turbulence model

(+ source terms in the turbulence equations to account for the effect of the dispersed phase)

### **Couplage entre phase**

#### Couplage avec l'écoulement gazeux (2/2)

$$S_{\rho} = \int 4\pi r^{2} \rho_{l} R f dv du dr d\theta$$
Vapor momentum
$$S_{\rho V} = -\int \mathbf{F}_{D} f dv du dr d\theta + \int 4\pi r^{2} \rho_{l} R \mathbf{v} f dv du dr d\theta$$

$$S_{\rho E} = -\int \mathbf{F}_{D} \cdot \mathbf{v} f_{pg} dv du dr d\theta - \int \frac{4\pi}{3} r^{3} \rho_{l} c_{l} \Im f dv du dr d\theta$$
Heat flux transfered to droplets
$$H = \frac{1}{2} \mathbf{v}^{2} + h_{v}(\theta) \cdot L_{v}(\theta) \int f dv du dr d\theta$$
Vapor enthalpy
$$Latent Heat release$$
with:
$$R = \frac{K_{ev}}{2r}$$
and
$$f = \text{the droplet density.}$$

THE FRENCH AEROSPACE LAB

124



Bilan : forme générale des équations à résoudre

Gas phase model

Dispersed phase source terms

(1) 
$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{x}} [F(\mathbf{W}, \nabla \mathbf{W})] = S_g(\mathbf{W}) + S_p(\mathbf{W}, f)$$

with: 
$$\mathbf{W} = (\rho_g, \rho_g \mathbf{V}_g, \rho_g E_g, \rho_g y_{vg}, \rho_g k_g, \rho_g \varepsilon_g)$$

**Dispersed phase model** 

Collision + fragmentation

(2) 
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{Z}}[\mathbf{a}(\mathbf{Z}, \mathbf{W})f] = Q(\mathbf{W}, \mathbf{Z}, f)$$

with:  $\mathbf{Z} = (\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{u}, r, \theta)$ 



#### Principe de la méthode particulaire



(2) doit être interprétée comme une formule de quadrature pour f, les  $n_i$  étant les poids et les  $x_i$  les noeuds.

$$\int f_0(x)\varphi(x)dx \approx \sum_{1\dots N} n_i \varphi(x_i)$$



#### Principe de la méthode particulaire

De même, on cherche une approximation de f(t,x) de la forme :

i

(3) 
$$f_N(t,x) = \sum_{i=1...N} n_i \delta_{x-x_i(t)}$$

avec bien sûr à l'instant initial :

$$f_N(0,x) = \sum_{i=1...N} n_i \delta_{x-x_i^0}$$

En injectant l'expression de  $f_N$  dans l'équation (1), on obtient :

$$\sum_{i=1...N} n_i (-x_i'(t) + a) \delta'_{x-x_i(t)} = 0$$

càd que  $f_N$  est solution de (1) ssi pour tout i :  $x_i'(t) = a$ .

Physiquement cette équation s'interprète en disant que les "noeuds" de la formule de quadrature de "déplacent" à la vitesse *a*.



#### Principe de la méthode particulaire

Dans le cas de SPARTE, l'équation à résoudre est plus complexe. Elle est

de la forme :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{z}}[\mathbf{a}(\mathbf{z})f] = Q_{frag}(f) + Q_{coll}(f)$$

avec  $\mathbf{Z} = (\mathbf{x}, \mathbf{v}, r, \theta, ....)$  et  $\mathbf{a}(\mathbf{z})$  le terme modélisant les phénomènes de transport, échange de chaleur et changement de phase. En l'absence de collision et fragmentation, la méthode particulaire (instationnaire) consiste donc à approcher la densité de particules  $f(\mathbf{t}, \mathbf{z})$  par une distribution de la forme :

$$f_N(t, \mathbf{z}) = \sum_{i=1...N} n_i(t) \delta_{\mathbf{z} - \mathbf{z}_i(t)}$$

avec z<sub>i</sub> solution du système différentiel :

(S) 
$$\frac{dz_i}{dt} = a(z_i)$$
 ;  $z_i(0) = z_i^0$ 

Schéma numérique (Euler, Runge Kutta, autres...)

ONERA

E FRENCH AEROSPACE LAB

### Principe de la méthode particulaire

Dans le cas général, où tous les phénomènes sont pris en compte, on utilise une méthode de pas fractionnaire, consistant à diviser chaque pas de temps en 4 étapes :

- Etape 1 : phase d'injection de nouvelles particules  $\rightarrow$  le poids et les propriétés ( $\mathbf{z}_i$ ) des nouvelles particules sont calculés de manière à reproduire statistiquement les propriétés initiales réelles de la phase dispersée et à en respecter le débit massique.
- Etape 2 : phase dite de « transport » → résolution numérique de (S) sur un pas de temps. L'influence des conditions aux limites est prise en compte lors de cette étape.
- Etape 3 : phase de collision  $\rightarrow$  algorithme de Monte-Carlo afin de simuler l'influence des collisions.
- Etape 4 : phase de fragmentation  $\rightarrow$  algorithme de Monte-Carlo afin de simuler l'influence de la fragmentation.

Principe de la méthode particulaire

Conditions aux limites disponibles dans SPARTE

- Condition de frontière libre.
- Condition de symétrie.
- Conditions de périodicité en rotation et en translation.
- Condition de frontière débitante.
- 3 types de conditions de paroi : dépôt systématique, rebond (modèle paramétrable), interaction complexe (éclaboussement, dépôt, caléfaction, grêle....).
- Condition de raccord multi-domaine (coïncident ou non) simple et avec « plan de mélange ».

#### Modèles phy siques disponibles dans SPARTE



**Remarque:** possibilité de suivre des particules de types différents (avec des modèles différents) dans un même calcul.

#### Principe de la méthode particulaire

Deux variantes de la méthode particulaire sont disponibles dans SPARTE :

• Méthode particulaire stationnaire : toutes les particules numériques sont injectées au même moment (au début du cycle) et le cycle SPARTE s'arrête lorsque plus aucune particule n'est encore présente dans le domaine de calcul. Possibilité de pas de temps local. Chaque particule est associée à une certaine fraction du débit total de la phase dispersée. Prise en compte des collisions impossibles.

• Méthode particulaire instationnaire : De nouvelles particules numériques sont injectées au début de chaque pas de temps SPARTE. Le cycle SPARTE s'arrête lorsque le temps écoulé est égal à la durée du cycle CEDRE. Chaque particule est associée à une certain nombre de particules réelles.



Couplage avec la phase gazeuse : mode « two-way coupling »

Dans CEDRE, le couplage entre CHARME et SPARTE se fait au début de chaque cycle CEDRE :

- CHARME envoie à SPARTE la dernière valeur du champ gazeux
- SPARTE envoie à CHARME la dernière valeur des termes source.



THE FRENCH AEROSPACE LAB

Couplage avec la phase gazeuse : mode « two-way coupling »

Les termes sources sont calculés de manière différente selon que l'on utilise la méthode particulaire stationnaire ou instationnaire.

• Si méthode stationnaire (exemple du terme source de masse) :



•Si méthode instationnaire (exemple du terme source de masse) :



Moyenne sur un cycle CEDRE



Couplage avec la phase gazeuse : two-way coupling

Technique de sous relaxation  $\rightarrow$  permet de stabiliser le couplage entre SPARTE et CHARME en mode 2-way coupling : Cycle CEDRE n  $S^{(n)} = \omega S^{*(n)} + (1-\omega) S^{(n-1)}$  avec  $S^{(0)} = 0$ 

que l'on peut interpréter comme un schéma d'Euler pour l'équation :

 $dS/dt = (S-S^*)/\tau_{relax}$  avec  $\omega = \Delta t_{cedre} / \tau_{relax}$ •Pour un écoulement stationnaire  $\rightarrow$  aucune restriction sur le choix de  $\omega$ 

• Pour un écoulement instationnaire  $\rightarrow \tau_{relax} = \Delta t_{cedre} / \omega$  doit être inférieur à l'échelle de temps caractéristique du phénomène instationnaire

# Quelques questions à se poser avant de lancer un calcul diphasique

- 1. One way-coupling ou two-way coupling ?
- 2. Méthode Stationnaire ou Méthode Instationnaire ?
- 3. Quelles sont les échelles de temps caractérisant la phase dispersée ?
- 4. Quels modèles dois je activer ?
- 5. Comment choisir le pas de temps SPARTE et le cycle CEDRE ?
- 6. Comment choisir le nombre de points d'injection et la période d'injection ?



One way-coupling ou two-way coupling ?

La grandeur déterminante est le taux de chargement massique en particules, c'est-à-dire le rapport des débits massiques des deux phases :

$$\eta = \frac{\dot{m}_p}{\dot{m}_g}$$

Valeur de η	η > 0.1	$0.1 > \eta > 0.01$	$0.01 > \eta$
Effet de la phase dispersée	La phase dispersée influence fortement la phase gazeuse.	En moyenne, la phase gazeuse est peu influencée par la présence des particules, sauf localement si l'écoulement est spatialement hétérogène.	Faible ou Très faible influence de la phase dispersée sur la phase gazeuse.
Type de couplage préconisé	Two-way coupling.	<b>One –way coupling</b> <b>ou two-way coupling</b> selon les cas.	<b>One-way coupling</b> (sauf exception, par exemple si objectif = calcul concentration en vapeur dans le gaz)



#### Méthode Stationnaire ou Méthode Instationnaire ?

	Méthode instationnaire	Méthode stationnaire
Avantages	<ul> <li>Peut traiter tous types d'écoulements</li> <li>Compatible avec tous les modèles physiques</li> </ul>	<ul> <li>Coût beaucoup plus faible (particules injectées une seule fois)</li> <li>Temps calcul très faible en mode 1-way coupling</li> </ul>
Inconvénients	<ul> <li>Coût assez élevé pour les écoulements instationnaires polydsipersés.</li> <li>Problème du choix de la période d'injection</li> </ul>	<ul> <li>N'est adaptée que pour les écoulements stationnaires.</li> <li>Ne peut pas prendre en compte les collisions.</li> </ul>

Bilan : réserver la méthode stationnaire aux écoulements stationnaires dilués (one-way coupling) et utiliser la méthode instationnaire dans les autres cas.

Quelles sont les échelles de temps caractérisant la phase dispersée ?

Temps de relaxation dynamique :

Temps de relaxation thermique :

$$\tau_p = \frac{\rho_l D_p^2}{18\mu_g}$$

$$\tau_{th} = \frac{\rho_l c_l D_p^2}{12\lambda_g}$$

Temps caractéristique d'évaporation :

$$\tau_{ev} \approx \frac{\rho_l D_p^2 L_v}{12\lambda_g \left| T_g - T_{eb} \right|}$$

Temps caractéristique de fusion / solidification :

$$\tau_{f/s} \approx \frac{\rho_l D_p^2 L_f}{12\lambda_g \left| T_g - T_f \right|}$$



Quelles sont les échelles de temps caractérisant la phase dispersée ?

Temps caractéristique de fragmentation: (formule valable si We > We\*)





Quelles sont les échelles de temps caractérisant la phase dispersée ?

Exemple : cas de la propulsion solide

$\rho_1$	c <sub>1</sub>	$\sigma_{l}$	$\mu_1$	T <sub>f</sub>	L <sub>f</sub>	ρ <sub>g</sub>	$\lambda_{g}$	$\mu_{g}$
2689 kg/m <sup>3</sup>	1509 J/kg/K	0.6024 N/m	0.0113 Pa/s	2318 K	9.61 10 <sup>5</sup> J/kg/K	0.5 (tuyère) 5 (chambre)	0.1 W/K/m	0.0001 Pa/s

Propriétés physiques de l'alumine à 3400 K

$ au_{coll}$	Diamètre 1 μm	Diamètre 50 μm
Diamètre	3.7 à 370 ms	0.0002 ms
1 μm	(Vr entre 0.001 et 0.1 m/s)	(Vr de l'ordre de 3 m/s)
Diamètre	100 ms	25 ms
50 μm	(Vr de l'ordre de 3 m/s)	(Vr de l'ordre de 3 m/s)

*Temps caractéristique de collision entre particules* (*Hypothèse :*  $\eta = 0.3$ , *avec* 80 % *petites particules*)

Echelle de temps	Diamètre 1 µm	Diamètre 10 μm	Diamètre 50 μm
$ au_{p}$	0.0015 ms	0.15ms	3.7 ms
$\tau_{c}$	0.0034 ms	0.34 ms	8.4 ms
$\tau_{s/f}$	0.00166 ms	0.166 ms (Tg = 1000 K)	4.15 ms (Tg = 1000K)
τ <sub>bup</sub> (tuyère)	Sans objet	0.035  ms (V <sub>r</sub> = 100 m/s)	0.035 ms (V <sub>r</sub> = 500 m/s)



Quels modèles dois je activer ?

Il faut tenir compte du temps de séjour des particules dans le système (ou dans une partie seulement du système en fonction du problème considéré) :

• Si  $\tau_s$  est très inférieur au temps caractéristique d'un phénomène physique  $\rightarrow$  ce phénomène est négligeable  $\rightarrow$  modèle non nécessaire.

• Si  $\tau_s$  supérieur ou du même ordre que le temps caractéristique d'un phénomène physique  $\rightarrow$  modèle nécessaire.

Exemple : calcul du MPS P230 à échelle 1.  $\tau_s$  est de l'ordre de 100 ms dans la chambre et de 5 ms dans l'ensemble convergent - tuyère. On a vu que pour une petite particule (D = 1 µm) le temps moyen de collision avec une grosse est de 100 ms et que le temps de fragmentation d'une particule de diamètre D = 50 µm est de 0.01 ms  $\rightarrow$  les modèles de fragmentation et de collision doivent être activés.

Comment choisir le pas de temps SPARTE ?

Le choix du pas de temps SPARTE a une influence sur :

• la précision du calcul de la trajectoire des particules car la vitesse du gaz pour le calcul de la force de traînée est uniquement évaluée au point ou se trouve la particule au début du pas de temps et la trajectoire est supposée rectiligne pendant un pas de temps  $\rightarrow$  rêgle heuristique : chosir  $\Delta t_{sparte}$  de sorte qu'en moyenne une particule mette 2 pas de temps pour traverser une cellule.

• la précision du calcul des termes source. A chaque pas de temps, la contribution d'une particule numérique n'est affectée qu'à la cellule dans laquelle elle se trouvait au début du pas de temps  $\rightarrow$  même conséquence sur le choix de  $\Delta t_{sparte}$ .

• la durée totale du calcul !  $\rightarrow$  il faut maximiser  $\Delta t_{\text{sparte}} \rightarrow$  compromis précision / temps calcul  $\rightarrow$  étude de sensibilité à faire sur quelques cas de référence typiques des
## **Préconisations**

Comment choisir le cycle CEDRE ?

#### 1<sup>er</sup> Cas : Calcul avec la méthode instationnaire.

Dans ce cas, la durée du cycle CEDRE a une influence sur :

la précision du calcul des termes source. Les termes sources associés à une cellule sont évalués en faisant la moyenne de toute les contributions des particules ayant "séjourné" dans la cellule pendant le cycle considéré →Forte influence si le nombre moyen de particules numériques / cellule est faible.

• la robustesse du couplage CHARME – SPARTE. Quand  $\Delta t_{CEDRE}$  augmente risque d'instabilité plus grand. Il est conseillé alors de diminuer la valeur du paramètre de relaxation  $\omega$ .

• la présision du calcul des débits de sous-limites (fichier histo\_sl\_sparte) : les débits

**Si phénomène instationnaire**, toujours vérifier que :  $\Delta t_{CEDRE} / \omega <<$  échelle de temps caractéristique phénomène instationnaire (période d'oscillation,...)



## **Préconisations**

Comment choisir le cycle CEDRE ?

#### 2<sup>nd</sup> Cas : Calcul avec la méthode stationnaire.

Dans ce cas. La durée du cycle n'a aucune influence sur le déroulement du calcul SPARTE. Il faut considérer deux sous-cas :

• en mode one-way coupling, elle peut être choisie arbitrairement petite ( mais non nulle !), à condition que le calcul démarre à partir d'un fichier de reprise contenant la solution stationnaire pour la phase gazeuse.

en mode two-way coupling, elle doit être choisie de l'ordre du temps nécessaire à la phase gazeuse pour converger vers un nouvel état stationnaire à la fin de chaque cycle CEDRE. Le temps total du calcul doit être un multiple de la durée du cycle CEDRE.



#### **Numerical simulation**

#### Computation domain

 $\Delta y_{min} = 10^{-3} \text{ m}$ 

- > 2D axisymetrical grid 200x150 points (20cm x 15cm)
- >  $\Delta x_{min} = 5.10^{-4} \text{ m}$ injection frontière libre  $\Delta x_{max} = 4.10^{-3} \text{ m}$ entrée / sortie Χ  $\Delta y_{max} = 3.10^{-3} \text{ m}$ axe entrée / sortie frontière libre g entrée / sortie frontière libre

#### **Boundary conditions for the injection**

- Injection conditions:
  - >Liquid : n-octane;
  - >Flow rate = 35 ml/mn;
  - >Temperature: 317.5 K.
- Injection modelling
  - > Description with 5 classes of diameters ( at Z=-5 mm);
  - > Diameter balanced of the velocity;
  - > The injection area is divided by 25 intervals:
    - 1 injection point / class / interval;
    - randomly position of the injection point;
    - constant velocity for every class;
    - injection period = 2.10<sup>-4</sup> s;
    - mass flow rate conservation.





#### **Size distribution**



- Expansion spray angle:  $\theta_{max} = 10^{\circ}$  (from experimental measures)

#### **Results - temperature**



ONERA THE FRENCH AEROSPACE LAB

## **Streamlines of the gas phase**





# Numerical simulation of the spray formation







## LPP module, simple configuration



### LPP numerical simulation

## Two phase flow simulation in a LPP duct





## LPP numerical simulation



Two phase flow simulation in a LPP duct

Two way coupling, spatial repartition of the vapour mass fraction



Two-phase flow computation in a simplified LPP – burned gas mass fraction and fuel drop locations



## LPP module with several air inlets



## LPP numerical simulation







# Spray ignition in a rectangular sector (MERCATO test bench)



## **MERCATO** test rig





## **Droplets injection model**

Simulation numérique — Injection de particules

Conditions initiales CEDRE/SPARTE : Extrapolation des mesures P.D.A.

Mesure PDA à y = 9 mm



- Symétrie cylindrique
- Distribution spatiale uniforme
- Distribution log-normale de tailles (d<sub>10</sub>, d<sub>32</sub>)

#### Injecteur SPARTE (3D)









## **Two phase flows computation**



THE FRENCH AEROSPACE LAB

#### **Droplets-wall interaction on MERRCATO** combustor





## Ariane 5 computations











### A real combustion chamber



#### Numerical Simulation of the Internal Tow Phase Flow Inside a Turbojet Combustion Chamber









3D Computation of a reactive two phase flow inside a real combustion chamber





# PRECCINSTA burner (LES approach, CEDRE ONERA code)







Figure 12a : RANS (Velocity Field)



Figure 12b : LES (Unsteady Velocity Field)



Figure 13a : RANS (Temperature Field)



Figure 13b : LES (Unsteady Temperature Field)

