

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Energétique et Transferts

Présentée et soutenue par :

M. DAMIEN PAULHIAC

le jeudi 30 avril 2015

Titre :

MODELISATION DE LA COMBUSTION D'UN SPRAY DANS UN BRULEUR AERONAUTIQUE

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

CERFACS (CERFACS)

Directeur(s) de Thèse :

MME BENEDICTE CUENOT

MME ELEONORE RIBER

Rapporteurs :

M. EPAMINONDAS MASTORAKOS, UNIVERSITE DE CAMBRIDGE

M. LUC VERVISCH, UNIVERSITE DE ROUEN

Membre(s) du jury :

M. FRÉDÉRIC GRISCH, UNIVERSITE DE ROUEN, Président

Mme BENEDICTE CUENOT, CERFACS, Membre

M. MICHEL CAZALENS, GROUPE SAFRAN, Membre

M. STÉPHANE JAY, INSTITUT FRANCAIS DU PETROLE (IFP), Membre

M. STEPHANE RICHARD, TURBOMECA, Membre

Abstract - Résumé

The combustion of hydrocarbons still represents the major part of the worldwide production of energy, especially for aerospace. Most industrials burners are fed with liquid fuel that is directly injected in the combustion chamber, generating a strong interaction between the spray, the turbulent flow and the combustion. This interaction has been widely studied, but is not yet fully understood. In particular, modeling individual droplet combustion, in the framework of Large Eddy Simulation (LES) of complex geometries, is a difficult issue. This work aims at improving models for spray combustion, in the context of two-phase reactive LES of complex configurations using an Euler-Lagrange approach. First, a droplet combustion model accounting for the various regimes and called *MuStARD* for « Multi-State Algorithm for Reacting Droplets » is proposed and validated on several academic configurations of growing complexity. Second, *MuStARD* is evaluated in the LES of a lab-scale burner and compared to classical models neglecting individual droplet combustion. Results show in particular the importance of the new model and its impact on the flame structure. Moreover, the comparison with experiments shows that *MuStARD* contributes to improve the numerical prediction of LES of two-phase reacting flows.

La combustion d'hydrocarbures représente encore aujourd'hui une part très majoritaire de la production d'énergie mondiale, en particulier dans la propulsion aérospatiale. La plupart des brûleurs industriels sont alimentés par un carburant sous forme liquide, qui est injecté directement dans la chambre de combustion, ce qui génère une forte interaction entre le spray, l'écoulement turbulent et la zone de combustion. Cette interaction a déjà largement été étudiée, mais certaines questions restent ouvertes. En particulier, la prise en compte de la combustion de goutte isolée dans le cadre de la Simulation aux Grandes Echelles ('Large Eddy Simulation' LES) de géométries complexes reste un problème difficile. L'objectif de cette thèse est d'améliorer la modélisation de la combustion du spray dans le contexte de la LES de configurations complexes avec une approche Euler-Lagrange. Dans un premier temps, un modèle de combustion de gouttes incluant les différents régimes pour la LES, appelé *MuStARD* pour « Multi-State Algorithm for Reacting Droplets », est proposé et validé dans plusieurs configurations académiques de complexité croissante. Dans un deuxième temps, *MuStARD* est évalué sur une configuration de brûleur expérimental et comparé aux modèles classiques sans combustion de gouttes isolées. Cette étude montre que le régime de combustion de gouttes isolées n'est pas négligeable dans une telle configuration et qu'il modifie la structure de flamme. D'autre part, les comparaisons avec les résultats expérimentaux montrent que le modèle *MuStARD* permet d'améliorer la précision des LES de sprays turbulents réactifs.

A mon épouse, et mes enfants. A Adrien Sonnet.

Remerciements

J'aimerai remercier les nombreuses personnes qui m'ont offert leur soutien et leur aide, pour mener à bien ce travail de recherche. Je pense tout d'abord à Bénédicte et Eléonore, pour leurs précieux conseils, notamment sur la rédaction et les présentations, et Stéphane Richard pour ces discussions techniques passionnantes et sa disponibilité.

Je pense à mes co-bureaux successifs, Damien Poitou, qui m'a offert son expérience, Adrien Sonnet, qui nous a éclairé de son humour, mais qui nous a quitté prématurément, et à qui j'aimerai dédicacer cette thèse. Sandrine, pour toutes ces bonnes discussions et partages de vie.

J'aimerai aussi remercier tous les collègues du CERFACS, anciens et nouveaux, qui font de ce labo un environnement très riche intellectuellement, ainsi que l'équipe CSG et l'administration, qui sont toujours disponibles et souriants pour nous aider.

Pour terminer, j'aimerai remercier mes parents, qui m'ont toujours soutenu, et par dessus tout mon épouse, Marie, pour son soutien indéfectible, et mes enfants, Agathe et Baudouin, pour leur capacité à nous donner de la joie !

Bonne lecture !

Table des matières

Partie I Contexte de l'étude

Chapitre 1 : Introduction générale

1.1 Contexte industriel 11
1.2 Généralités sur le fonctionnement d'un moteur d'hélicoptère 12
1.3 Intérêts et limites de la simulation numérique 19

Chapitre 2 : Interactions spray/combustion/turbulence

2.1 Introduction 23
2.2 Interaction entre un spray non réactif et la turbulence 25
2.3 Interaction entre spray et combustion en régime laminaire 28
2.4 Etude d'un spray turbulent réactif 43
2.5 Objectifs et plan de la thèse 61

Partie II Equations et modèles pour la combustion turbulente d'un spray

Chapitre 3 : Simulation de l'écoulement gazeux turbulent réactif - Equations et modèles

3.1 Principales notions en turbulence et en combustion 65
3.2 Cinétique chimique 69
3.3 Equations conservatives de la phase gazeuse 70

3.4 Système d'équations LES **72**

Chapitre 4 : Simulation du spray évaporant - Equations et modèles macroscopiques

4.1 Approche lagrangienne déterministe **77**

4.2 Modèles macroscopiques de l'évolution d'une goutte isolée **81**

4.3 Fonctionnement d'AVBP et modèles utilisés dans la suite. **94**

Partie III Développement et optimisation de fonctionnalités dans le solveur lagrangien d'AVBP

Chapitre 5 : Modification du principe de localisation et de transport des particules, injection.

5.1 Modification du principe de localisation et de transport des particules **100**

5.2 Méthode d'injection d'un spray selon une distribution discrète quelconque **108**

Chapitre 6 : Conséquences de l'approche "point-source" en LES Euler-Lagrange

6.1 Limitations de l'approche "point-source" en LES **113**

6.2 Méthode de limitation de l'erreur point-source **116**

Chapitre 7 : Optimisation de la convergence statistique des méthodes lagrangiennes

7.1 Contexte **119**

7.2 Formulation du problème **120**

7.3 Choix de la répartition des particules numériques **123**

7.4 Conclusions et perspectives sur l'optimisation de la convergence statistique **135**

Partie IV Modélisation de la combustion diphasique

Chapitre 8 : Modèle de combustion diphasique

8.1 Adaptation of the Thickened Flame model in the presence of droplets **142**

8.2 Multi-state Algorithm for Reactive Droplets, *MuStARD* **151**

8.3 Summary of the chapter. **171**

Chapitre 9 : Application du modèle *MuStARD* à des cas académiques simples

9.1 Goutte isolée statique - configuration 0D **176**
9.2 Train de gouttes dans un écoulement chaud - configuration 1D **177**
9.3 Flamme laminaire à contre-courant diphasique - Configuration 2D **179**
9.4 Conclusions sur ce chapitre **191**

Partie V Application à la combustion turbulente d'un spray

Chapitre 10 : Configuration de calcul et mise en oeuvre numérique

10.1 Présentation de la configuration **197**
10.2 Mise en oeuvre de la simulation **199**

Chapitre 11 : LES diphasique réactive du bruleur de Cambridge avec approche standard

11.1 Cas non réactif **207**
11.2 Cas réactif. **210**
11.3 Analyse de la structure de flamme avec le modèle d'évaporation seul **217**

Chapitre 12 : Simulation LES du brûleur Cambridge avec le modèle *MuStARD*

12.1 Champs moyens de la phase gazeuse **231**
12.2 Champs moyens de la phase liquide **235**
12.3 Analyse de la structure de flamme instantanée **239**
12.4 Conclusions du chapitre **243**

Conclusions générales et perspectives

Liste des symboles

Acronymes

CFD 'Computational Fluid Dynamics', mécanique des fluides numérique

CRZ 'Corner Recirculation Zone', zone de recirculation périphérique

IRZ 'Inner Recirculation Zone', zone de recirculation centrale

MuStARD 'Multi-State Algorithm for Reactive Droplets', modèle de combustion diphasique développé en Chap. 8.

NTC 'Negative Temperature Coefficient', plage de température où le délai d'auto-allumage d'une mélange augmente avec la température

RMS 'Root Mean Square', moyenne quadratique

TRL 'Technology Readiness Level', niveau de maturité technologique

CERFACS Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique

2S_C7H16_DP Chimie réduite pour un mélange n-heptane/air, développée en Sect. 9.3.1.3.

AVBP Code CFD développé par le CERFACS et IFP-EN

SWH1 Dénomination dans [204] du point de fonctionnement choisie pour la validation

AS Dénomination des résultats associés à la méthode standard (modèle d'évaporation d'Abramzon & Sirignano [2]).

SMD Diamètre Moyen de Sauter

DNS Direct Numerical Simulation, simulation haute fidélité de toutes les échelles physiques mises en jeux

DPS Discrete Particule Simulation, approche lagrangienne déterministe

HPC High Performance Computation, calcul haute performance

IFP-EN Institut Francais du Pétrole - Energie Nouvelle

LES Large Eddy Simulation, simulation aux grandes échelles

LDA Laser-Doppler Anemometry, anémométrie laser Doppler

PIV Particle Image Velocimetry, anémométrie par image de particule

PDA Phase Doppler Anemometry, anémométrie par phase Doppler

PLIF Planar Laser Induced Fluorescence, fluorescence induite par une nappe laser

PVC Precessing Vortex Core, structure hydrodynamique tournante dans les écoulements tourbillonants

PMD Puissance Maximale au Décollage

TFLES Thickened Flame model for LES, modèle de flamme épaissie pour la LES [162]

THI Turbulence Homogène Isotrope

TP-TFLES Two-Phase TFLES , adaptation du modèle TFLES en présence d'un spray (Sect. 8.1)

Symboles grecques

λ Coefficient de diffusion thermique

η_K Echelle spatiale de Kolmogorov

ϵ Energie cinétique turbulente

Φ Flux massique

α_l Fraction volumique de liquide

ρ Masse volumique

$\dot{\omega}_k$ Taux de consommation massique de l'espèce k

χ Taux de dissipation scalaire

τ_p Temps de relaxation dynamique de la particule

ν Viscosité cinématique

μ Viscosité dynamique

Symboles romains

C_P Capacité calorifique à pression constante

L_v Chaleur latente de vaporisation

$\mathcal{D}$ Coefficient de diffusion

$\mathcal{C}_D$ Coefficient de traînée d'une particule

s Coefficient stoechiométrique massique

$\mathfrak{R}$ Constante des gaz parfaits

r Coordonnée radiale ou rayon

Q Dégagement de chaleur massique

$\mathcal{D}/\mathcal{D}t$ Dérivée particulaire

d Diamètre

h_s Enthalpie sensible

A Facteur pré-exponentiel de la loi chimique d'Arrhénius

$\dot{m}$ Flux massique

$\vec{F}_D$	Force de traînée d'une particule
Z	Fraction de mélange
Y_k	Fraction massique de l'espèce k
X_k	Fraction molaire de l'espèce k
H_R	Heat-release, Dégagement de chaleur
I_{flame}	Indice de Takeno [201]
W_k	Masse molaire de l'espèce k
G	Nombre de combustion de groupe [46]
$\mathcal{L}e$	Nombre de Lewis (Eq. 4.39)
$\mathcal{N}u$	Nombre de Nusselt
$\mathcal{P}_r$	Nombre de Prandtl
$\mathcal{R}_e$	Nombre de Reynolds
$\mathcal{S}_c$	Nombre de Schmidt
$\mathcal{S}h$	Nombre de Sherwood
B_M	Nombre de Spalding de masse (Eq. 4.23)
B_M^{comb}	Nombre de Spalding de masse pour une goutte isolée en combustion
B_T	Nombre de Spalding thermique (Eq. 4.38)
B_T^{comb}	Nombre de Spalding thermique pour une goutte isolée en combustion
$\mathcal{S}_t$	Nombre de Stokes
P	Pression
Δx	Taille de la cellule du maillage
a	Taux d'étirement
T	Température
x	Variable d'espace
t	Variable de temps
$\vec{u}$	Vecteur vitesse

Annotations

st	Variable évaluée à la stoechiométrie
ζ	Variable évaluée à la surface de la goutte
∞	Variable évaluée au champ lointain, considéré à l'infini
ext	Variable à l'extinction
F	Variable associée à l'espèce carburant ('Fuel')
Ox	Variable associée à l'espèce oxydante
$_f$	Variable associée à la flamme dans le cas d'une combustion de goutte isolée
p	Variable associée à la particule
g	Variable associée à la phase gazeuse, porteuse
$\widehat{\ }$	Variable filtrée pour la LES

Première partie

Contexte de l'étude

Chapitre 1

Introduction générale

Sommaire

1.1 Contexte industriel 11
1.2 Généralités sur le fonctionnement d'un moteur d'hélicoptère 12
1.2.1 Principes de fonctionnement d'une turbine à gaz 12
1.2.2 Régime de fonctionnement d'un moteur d'hélicoptère 15
1.2.3 Technologies usuelles d'injection du carburant liquide 16
1.2.4 Obtention d'un spray atomisé dilué 17
1.3 Intérêts et limites de la simulation numérique 19

1.1 Contexte industriel

En raison de l'épuisement progressif des réserves de pétrole d'une part et de problèmes environnementaux de plus en plus préoccupants d'autre part (pollution atmosphérique et changement climatique lié à l'émission de gaz à effet de serre notamment), la conversion d'énergie par combustion est au coeur d'enjeux actuels majeurs. Des solutions alternatives à la combustion, plus respectueuses de l'environnement et plus durables, sont en développement et prennent progressivement une part de plus en plus importante de la production mondiale d'énergie.

Cependant, les contraintes spécifiques liées au transport aérien ne permettent pas d'envisager à l'heure actuelle d'autres alternatives à la combustion d'hydrocarbures. En effet, la propulsion aéronautique nécessite un rapport poids/puissance et une autonomie que seule la propulsion thermique avec carburant liquide est capable de fournir, notamment du fait de la densité énergétique très importante du carburant par rapport à d'autres méthodes de stockage d'énergie (batterie, pile à hydrogène, propulsion nucléaire...). Ce constat justifie le financement d'efforts de recherche très importants pour améliorer la connaissance et la maitrise des procédés de combustion et de conver-

sion d'énergie, afin de concevoir des moteurs plus propres, plus économes et plus performants, pour l'aéronautique en particulier.

Dans ce contexte, la thèse présentée ici s'intéresse spécifiquement à la chambre de combustion d'un moteur aéronautique et au développement de méthodes numériques permettant de simuler l'écoulement réactif interne. Dans cette introduction, le principe de fonctionnement d'une turbine à gaz et de certaines technologies spécifiques aux moteurs d'hélicoptères est présenté dans un premier temps. Dans un second temps, l'intérêt d'utiliser la simulation numérique pour obtenir de précieuses informations sur cet écoulement, ainsi que les limites actuelles de cette simulation sont brièvement décrits.

1.2 Généralités sur le fonctionnement d'un moteur d'hélicoptère

L'hélicoptère est sûrement le moyen de transport le plus sensible au rapport poids/puissance de sa motorisation. Jusque dans les années 50, les quelques hélicoptères existants sont équipés de moteurs à piston en étoile ou en ligne. Dans les années 1955, Sud Aviation met au point l'Alouette II, premier hélicoptère équipé d'une turbine à gaz, l'Artouste II, fabriquée par Turboméca. Ce type de moteur se généralise rapidement du fait de son très bon rapport poids/puissance. De plus, l'utilisation d'une turbine libre par rapport au moteur, mais liée au rotor de sustentation, permet une grande souplesse de fonctionnement, en permettant des variations importantes de couple du moteur tout en maintenant une vitesse de rotation du rotor de sustentation constante.

1.2.1 Principes de fonctionnement d'une turbine à gaz

Le fonctionnement d'une turbine à gaz peut se résumer par le cycle thermodynamique illustré en Fig. 1.1, basé sur le cycle de Brayton (ou cycle de Joule). Dans le cas idéal du cycle de Brayton-Joule, le flux d'air $\dot{m}$ entrant dans le moteur subit les transformations suivantes :

②-③ **compression isentropique à travers le compresseur** : l'écoulement reçoit le travail $\dot{W}_c$. Dans une turbine à gaz, cette compression est obtenue soit par des étages de compression centrifuge, soit par des étages de roues à aubes successives.

③-④ **combustion isobare** dans la chambre de combustion : l'écoulement reçoit la chaleur $\dot{Q}_{ch}$ dégagée par la réaction chimique du carburant avec l'air entrant.

④-⑤ **détente isentropique dans la turbine** : l'écoulement libère le travail $\dot{W}_t$. Dans une turbine à gaz, une partie de ce travail est utilisée pour fournir le travail initial de compression $\dot{W}_c$.

La puissance nette dégagée par le moteur pour un flux massique $\dot{m}$ donné correspond à $\dot{W}_{net} = \dot{W}_t - \dot{W}_c$ et est proportionnelle à l'aire limitée par la courbe 2-3-4-5. Le rendement thermodynamique du cycle, $\eta_T = \dot{W}_{net}/\dot{Q}_{ch}$, correspond au rapport entre puissance nette dégagée et chaleur dépensée, elle-même proportionnelle à la quantité de carburant. On peut montrer dans le cas du cycle idéal, que le rendement est lié au rapport de pression P_3/P_2 par la relation $\eta_T = 1-(P_2/P_3)^{(\gamma-1)/\gamma}$, où P_i

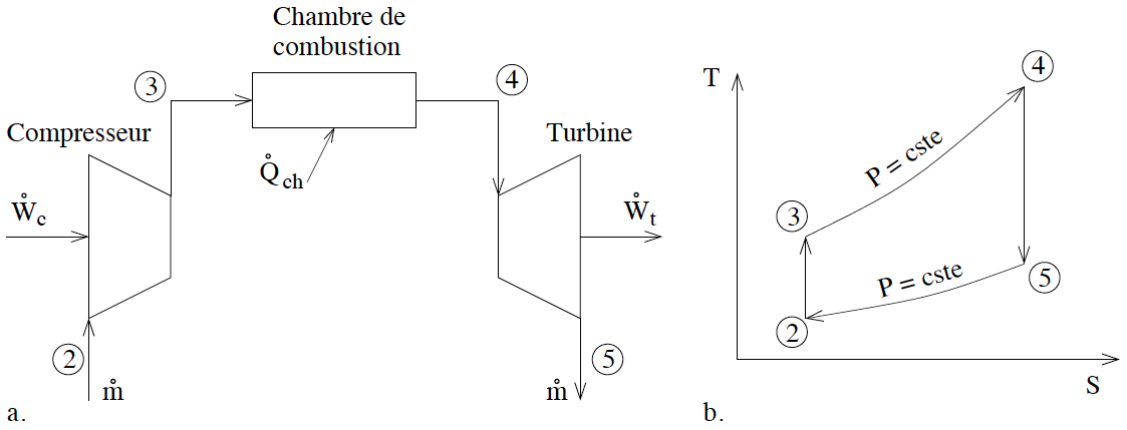

Figure 1.1 : *a. Schéma simplifié du cycle thermodynamique d'une turbine à gaz ; b. Cycle idéal de Brayton-Joule (température T - entropie S) (d'après [141]).*

est la pression au point i du cycle idéal et γ est l'exposant polytropique du gaz. L'augmentation du rapport P_3/P_2 à puissance constante tend donc à produire un moteur plus économe en carburant. Mais cette augmentation est limitée par certaines contraintes technologiques, notamment la température en entrée de turbine T_4 contrainte par la résistance thermique des matériaux composant la turbine. De plus, dans le cycle réel, les transformations comportent des irréversibilités qui se traduisent par des pertes de charge et des pertes thermiques, qui réduisent le rendement et la puissance du moteur pour un flux massique $\dot{m}$ donné.

Depuis leur début dans les années 1930-1940, les turbines à gaz ont bénéficié de très fortes améliorations en termes de rendement global, de puissance absolue, de rapport poids/puissance, d'encombrement, de durée de vie, d'endurance et de fiabilité, d'émission de polluants et de bruit. Ces progrès ont notamment été rendus possibles par l'amélioration du compresseur (augmentation du rapport de pression et du rendement polytropique), l'amélioration de la chambre de combustion (masse, pertes de charges, émission de polluants, efficacité de combustion...) et l'amélioration de la turbine (résistance des matériaux à la température et techniques de refroidissement).

Les caractéristiques des moteurs actuels diffèrent selon les applications. Dans le cas des turbo-propulseurs [1], la puissance thermodynamique résiduelle $\dot{W}_{net}$ est principalement utilisée pour faire tourner une hélice non carénée. Dans le cas de turbo-réacteurs équipant les avions de chasse ou les avions commerciaux type $A320$, $\dot{W}_{net}$ est utilisée d'une part pour la propulsion d'un jet haute vitesse à travers une tuyère et, d'autre part, pour l'entraînement d'une hélice carénée. La répartition entre ces deux contributions propulsive du moteur diffère suivant les applications : un avion de chasse est quasi exclusivement propulsé par le jet haute vitesse, du fait de la contrainte de place, tandis qu'un turboréacteur d'avion commercial est propulsé majoritairement par l'hélice carénée, plus efficace. Pour améliorer le rendement des moteurs d'avions commerciaux, une tendance de fond

1. Moteurs équipant notamment les petits avions commerciaux type 'ATR'.

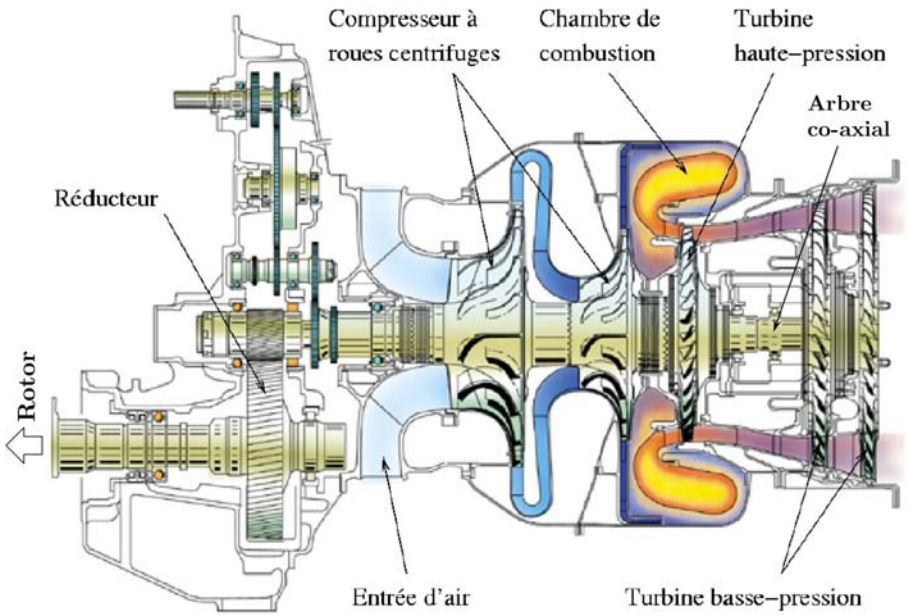

Figure 1.2 : *Vue en coupe du moteur Ardiden de Turboméca.*

est à l'augmentation continue de la contribution de l'hélice carénée, ce qui explique l'apparition de turboréacteur à très grand diamètre sur les avions récents (Boeing 777, A380, A350). Ce choix nécessite de construire autour du moteur une carène de grande taille (la nacelle), qui entraîne une trainée et un poids plus importants. Afin de dépasser cette limitation et augmenter davantage les rendements du moteur, l'utilisation d'hélices contra-rotatives non carénées [2] est envisagée dans un futur proche. Pour un moteur d'hélicoptère, $\dot{W}_{net}$ est intégralement convertie en énergie mécanique de rotation, ce qui assure la sustentation et la propulsion via le rotor. La puissance de ces moteurs, généralement plus faible que celle d'un turboréacteur, conduit souvent aux choix technologiques suivants, illustrés pour le moteur Ardiden en Fig. 1.2 :

1. un compresseur comportant peu d'étages de compression, généralement de type centrifuge ;
2. une chambre de combustion annulaire à flux inversé, permettant notamment d'augmenter la compacité du moteur ;
3. une turbine haute-pression montée sur l'arbre du compresseur ;
4. une turbine basse pression, libre, liée au rotor sustentateur.

La détente se fait à travers la turbine haute pression couplée au compresseur, puis à travers les deux étages de la turbine basse pression, liés au rotor sustentateur par un arbre coaxial couplé à un réducteur (à gauche dans Fig. 1.2).

La chambre de combustion à flux inversé crée un écoulement particulièrement complexe, illustré en Fig. 1.3. L'air entrant issu du compresseur est ralenti et redressé par le diffuseur, dans la direction

2. CROR pour 'Contra-Rotating Open Rotor

axiale du moteur. En contournant la paroi du foyer, une partie de cet écoulement est prélevée par divers orifices ayant des rôles spécifiques :

- l'injecteur et les trous d'air primaire alimentent la zone primaire où est localisée la flamme,
- les trous d'air de dilution abaissent la température des gaz brûlés pour préserver les pales de la turbine,
- les films et les parois multi-perforées créent une couche d'air frais qui limite le flux de chaleur des gaz brûlés vers les parois du foyer.
- Le coude redresse enfin l'écoulement issu des foyers et assure une homogénéisation thermique du mélange avant l'entrée dans la turbine haute-pression.

Ce type de chambre de combustion constitue le système industriel de référence dans la suite de la thèse.

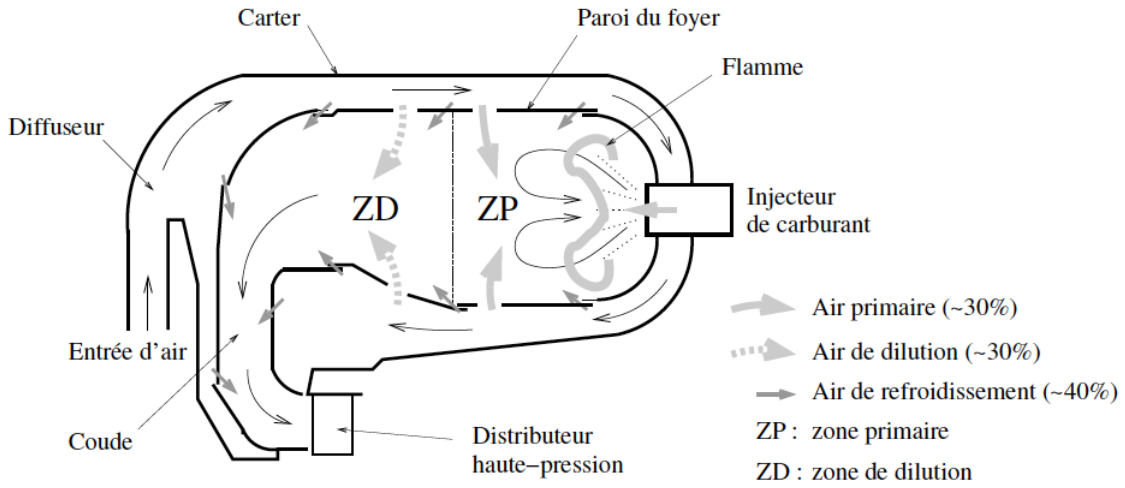

Figure 1.3 : *Coupe schématique d'une chambre de combustion annulaire à flux inversé (d'après Lefebvre [126]).*

1.2.2 Régime de fonctionnement d'un moteur d'hélicoptère

Un moteur d'hélicoptère est amené à travailler dans des conditions d'entrées très variées, du fait du large domaine de vol imposé par les missions d'hélicoptères (grand froid, haute altitude...). Les conditions d'entrées les plus critiques pouvant être rencontrées en sortie de compresseur (Point 3. en Fig. 1.1) correspondent au point de fonctionnement "Puissance Max Décollage" (PMD) (température $T_3 = 750\ K$ et pression $P_3 = 20$ bar), et "Démarrage grand froid en altitude" (température $T_3 = 250\ K$ et pression de $P_3 = 0,5$ bar). La température du carburant en sortie d'injecteur peut varier de 250 K à 400 K. Comme le point critique d'un carburant aéronautique type *Jet-A* est d'environ $T_{crit} = 700\ K$ et $P_{crit} = 24\ bar$ [65] et que sa température de fusion est de l'ordre de 250 K, le carburant injecté est bien liquide et en régime sous-critique dans l'ensemble du régime de fonctionnement d'un moteur d'hélicoptère.

1.2.3 Technologies usuelles d'injection du carburant liquide

Le carburant sous forme liquide doit être vaporisé avant de pouvoir brûler avec l'air entrant dans la chambre. La combustion du carburant liquide doit être complète afin d'assurer un niveau maximum d'efficacité, et se faire sur une distance la plus courte possible, afin de maximiser la compacité de la chambre de combustion. Pour atteindre ces objectifs, l'une des méthodes les plus efficaces et les plus simples est de pulvériser ce carburant en un spray de gouttelettes les plus fines possibles. Plus les gouttes sont fines, plus l'évaporation du liquide et le mélange de la vapeur de carburant avec l'air sont rapides, ce qui permet à la combustion de s'opérer dans un milieu le plus homogène possible. De plus, cette pulvérisation doit être assurée quel que soit le point de fonctionnement du moteur, dans son domaine de vol.

Le système d'injection doit également respecter les contraintes suivantes :

- **Sécurité** : le carburant est une matière hautement inflammable, qui impose de sévères contraintes de manipulation et d'utilisation.
- **Simplicité de fabrication et d'entretien** : il s'agit notamment de maîtriser les coûts d'entretien, qui sont les principaux coûts de fonctionnement d'un hélicoptère. Le système d'injection étant parfois profondément enfoui dans le carter du moteur, il peut être nécessaire de déposer le moteur pour effectuer une maintenance sur les injecteurs.
- **Légèreté et compacité** : dans le cadre d'un engin volant, toute masse économisée sur une pièce entraîne un double effet bénéfique. Premièrement, cette masse économisée devient disponible pour la charge utile ou l'autonomie. Deuxièmement, cette économie peut potentiellement se traduire aussi par une réduction de la masse structurelle, associée à la masse économisée.

Avec ces contraintes, on rencontre principalement trois types d'injection dans les moteurs d'hélicoptères (Fig. 1.4) :

- **L'injection pré-vaporisée** (a.) : le carburant liquide est grossièrement pulvérisé dans un tube coudé, appelé "canne d'injection", immergé dans le flux chaud de la chambre de combustion. L'échange thermique à travers les parois de la canne entraîne l'évaporation complète du carburant avant la sortie du tube. Un flux d'air frais est injecté dans le tube pour préparer un mélange réactif disponible dès la sortie du tube coudé. Ce système a l'avantage d'être simple et compact. En revanche, il ne permet généralement pas d'assurer une bonne pré-vaporisation lors des ré-allumages en altitude, pour lesquels la température T_3 (Fig. 1.1) peut être très basse. De plus, l'immersion de la canne d'injection dans une zone très chaude peut entrainer sa détérioration. Enfin, la préparation d'un mélange réactif en amont de la chambre de combustion n'est pas toujours souhaitable. En termes de sécurité, sa présence dans la canne peut générer des phénomènes non souhaités de retour de flamme dans le système d'injection. En termes de stabilité, le pré-mélange est généralement pauvre en carburant, car il est nécessaire d'injecter beaucoup d'air dans la canne pour stabiliser la flamme en sortie de canne, ce qui favorise les phénomènes d'extinction et d' instabilités de combustion.

– **L'injection centrifuge** (b.) : c'est une technologie propre aux moteurs Turboméca, qui consiste à pulvériser le carburant par centrifugation au moyen d'une roue percée, mise en rotation à très haute vitesse par l'arbre moteur. Cette technique a l'avantage de créer une atomisation de qualité sans circuit de carburant haute pression, et ce quel que soit le point de fonctionnement du domaine de vol. Il s'agit d'une injection directe, puisque le carburant est introduit sous forme liquide dans la chambre.
– **L'injection aéro-mécanique** (c.) (*prefilming airblast*) : le carburant est injecté sous la forme d'une nappe liquide appelée "film liquide", pulvérisée en aval par deux jets co-axiaux contra-rotatifs, ce qui génère un fort cisaillement aérodynamique. Ce système, très répandu, fonctionne très bien à des pressions d'air élevées et génère un spray fin directement injecté dans la chambre de combustion. Cette technologie a l'avantage de créer une zone de recirculation centrale qui maintient la flamme proche de l'injecteur, et ainsi la stabilise.

Dans cette thèse, nous nous intéresserons essentiellement à l'injection directe (type b. et c.), pour laquelle le carburant liquide est directement injecté dans la chambre de combustion et interagit fortement avec l'écoulement et la zone réactive.

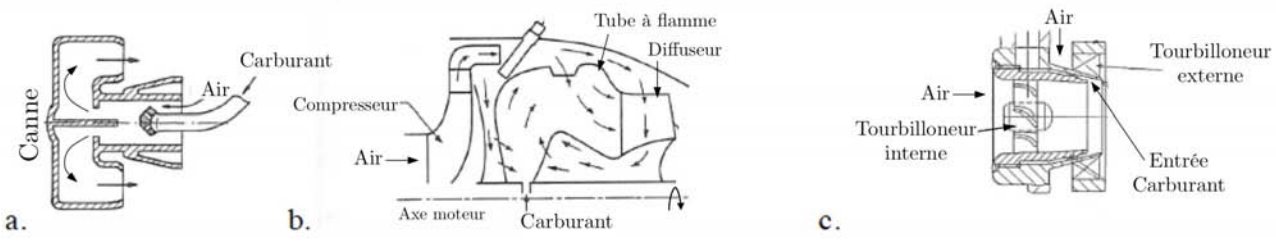

Figure 1.4 : *Principaux types d'injecteurs utilisés dans les moteurs d'hélicoptères : à pré-vaporisation (a.), à roue centrifuge (b.), aérodynamique à préfilm (c.) (extraits de Lefebvre [126]).*

1.2.4 Obtention d'un spray atomisé dilué

1.2.4.1 Mécanisme d'atomisation du carburant liquide dans le cadre d'une injection directe

Les phénomènes physiques permettant à une nappe de carburant liquide issue d'un système d'injection directe de s'atomiser en un nuage de gouttes très fines sont brièvement schématisés en Fig. 1.5.

L'atomisation primaire consiste en la désintégration d'une nappe liquide en poches de liquide de grande taille. Elle a pour origine une instabilité à la surface de la nappe, qui croît jusqu'au détachement de grosses gouttes et de formes liquides allongées, appelées ligaments. Cette instabilité est due soit à une fort cisaillement à l'interface liquide/gaz, soit à une variation brutale de pression en sortie d'injecteur.

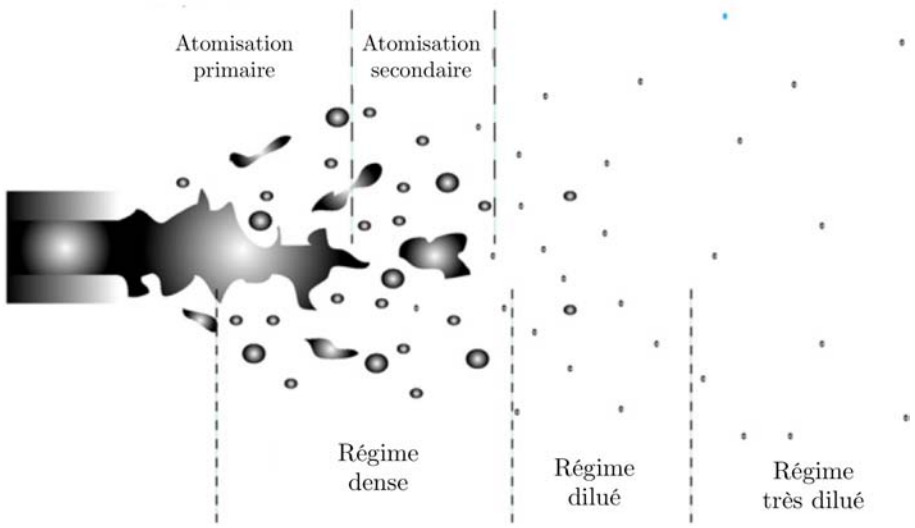

Figure 1.5 : *Dénomination des différents mécanismes permettant de passer d'une nappe de carburant liquide à un nuage de gouttes fines (extrait de [105]).*

L'atomisation secondaire correspond à la désintégration des ligaments et des grosses gouttes en fines gouttelettes, induite par un fort écoulement d'air. Il y a alors compétition entre les forces aérodynamiques puissantes qui déstabilisent la surface de ces grosses structures et les forces de tension de surface qui tendent à maintenir ensemble les structures liquides. Plus la vitesse entre l'écoulement gazeux et les structures liquides est grande, plus le spray généré est fin.

Dans cette thèse, nous ne nous intéresserons qu'aux phénomènes physiques apparaissant lorsque l'atomisation du spray est complète, sans considérer la complexité associée à la méthode d'injection et aux mécanismes d'atomisation. On considère donc un spray formé initialement de fines gouttelettes, pouvant être considérées comme sphériques du fait des forces de tension de surface.

1.2.4.2 Caractérisation d'un spray liquide dilué

Une des méthodes les plus répandues pour évaluer rapidement la densité d'un spray consiste à mesurer la proportion locale de volume liquide relativement au volume gazeux, ainsi que la fraction massique associée au spray. Ces données peuvent s'écrire respectivement sous la forme d'une fraction de volume liquide α_l et de masse liquide M_l :

$$\alpha_l = \frac{V_l}{V_{tot}} \tag{1.1}$$

$$M_l = \frac{m_l}{m_{tot}} \tag{1.2}$$

où V_l, V_{tot}, m_l et m_{tot} sont respectivement le volume liquide et total et la masse liquide et totale. Les écoulements gaz/spray peuvent être classifiés grâce à la donnée de ces deux nombres [70] (Fig. 1.5) :

- $\alpha_l > 10^{-1}$ **: très forte densité du spray.** Les interactions entre les différentes structures liquides et entre phase liquide et gazeuse sont prépondérantes.
- $10^{-4} < \alpha_l < 10^{-1}$ **: régime modérément dense**. Dans ce régime, les interactions entre gouttes voisines diminuent fortement sans devenir complètement négligeables.
- $\alpha_l < 10^{-4}$ **et** $M_l > 10^{-2}$ **: régime dilué**. Les phénomènes inter-gouttelettes, tels que les collisions ou les interactions entre gouttes proches, peuvent être raisonnablement négligés. Les gouttes peuvent être considérées comme isolées les unes des autres et traitées séparément. En revanche, l'interaction gaz/liquide doit toujours être prise en compte dans ce régime, car l'inertie de la masse liquide n'est pas négligeable.
- $\alpha_l < 10^{-4}$ **et** $M_l < 10^{-2}$ **: régime fortement dilué.** La faible inertie de la phase liquide permet de négliger l'impact de la phase liquide sur la phase gazeuse.

A la sortie d'un injecteur, la densité du spray décroit fortement du fait de son expansion et de la dispersion turbulente associée. Ainsi, dans une chambre de combustion aéronautique, on est en présence d'un spray dilué dans la classification de Fede [70]. Dans cette thèse, on considère donc un spray dilué : les collisions entre gouttes sont négligées et les gouttes sont considérées comme isolées les unes des autres.

Lorsque le spray est composé de gouttes de différentes tailles, on parlera d'un spray **polydisperse**, ce qui est le cas de la plupart des sprays dilués. Dans certains cas, notamment académiques, il est cependant intéressant de générer un nuage de gouttes de même diamètre, afin d'isoler la contribution de la polydispersité du spray : on parlera dans ce cas d'un spray **monodisperse**.

1.3 Intérêts et limites de la simulation numérique

La mécanique des fluides apparait au XIXe siècle, grâce à l'ingénieur français Claude Navier et au mathématicien irlandais George Stokes qui, de manière indépendante, établissent les équations permettant de calculer la vitesse et la pression du fluide autour d'un objet. Ces équations sont aujourd'hui largement connues sous le nom d'équations de Navier-Stokes. C'est le développement conjoint de méthodes numériques permettant de discrétiser ces équations et des capacités de calculs par ordinateurs, qui ont permis l'avénement de la la mécanique des fluides numérique ("Computational Fluid Dynamics" en anglais (CFD)), dans les années 60. Avant cette période, seuls des dispositifs expérimentaux, tels que les souffleries, permettaient de tester et d'optimiser l'aérodynamique des nouveaux engins volants.

Depuis les années 60, la CFD prend une part de plus en plus importante dans la conception des formes aérodynamiques et des processus internes au moteur, notamment aux premiers stades de développement où prédomine la méthode "essais-erreurs". La conception initiale nécessite généralement la fabrication et l'étude de nombreux prototypes, explorant différentes pistes d'optimisation, généralement beaucoup plus coûteux à obtenir en soufflerie qu'en simulation. Le développement continu des modèles utilisés en CFD, introduisant notamment la résolution de phénomènes phy-

siques de complexité croissante, a permis d'accroître progressivement la précision des résultats numériques et l'étendue d'application de la CFD. L'utilisation intensive de la CFD a contribué à optimiser de manière très importante les turbines à gaz (de l'ordre de 25% en 50 ans), tout en réduisant leur coût et leur temps de conception. Pour citer un autre exemple, le développement d'une nouvelle forme d'aile d'avion implique aujourd'hui de deux à quatre essais en soufflerie, quand il en fallait 10 à 15 dans le passé pour obtenir une forme encore insuffisamment optimisée. Cet exemple montre aussi qu'il n'est aujourd'hui pas encore possible de se passer d'essai pour la conception, et ce pour plusieurs raisons. La première correspond aux limites actuelles des modèles CFD, qui ne sont pas toujours capables de rendre parfaitement compte du réel. Un essai est nécessaire si un résultat fiable est recherché dans la zone d'incertitude de la simulation numérique. La deuxième raison, beaucoup plus limitante, est liée à la faisabilité effective d'une simulation en contexte industriel. Ces deux obstacles expliquent la nécessité encore actuelle de mener des essais en conditions réelles dans l'industrie.

L'utilisation de la CFD haute fidélité en industrie nécessite une conciliation optimale entre précision des résultats et temps pour les obtenir [3]. Généralement, l'amélioration des méthodes de résolution est réalisée dans les laboratoires de recherche. Le transfert de ces méthodes au contexte industriel demande souvent du temps, et n'est parfois tout simplement pas envisageable à plus ou moins long terme. Le transfert technologique des méthodes CFD de la recherche vers l'industrie est particulièrement bien caractérisé par l'échelle TRL, pour "Technology Readiness Level" en anglais, que l'on pourrait traduire par "Niveau de Maturité Technologique". Cette échelle qui compte dix niveaux a plusieurs définitions, mais fait l'objet d'une tentative de normalisation internationale. Les trois premier niveaux TRL correspondent à la première définition d'une nouvelle technologie ou savoir : c'est l'apanage de la recherche fondamentale. Les niveaux 4 et 5 correspondent à la mise en place des premiers résultats, de la démonstration de la faisabilité et d'une première validation des résultats : c'est la recherche appliquée. Les derniers niveaux correspondent à une technologie ayant fait ses preuves, étant validée dans une application finalisée, en conditions réelles : c'est le domaine du bureau d'études et de la production. L'un des objectifs de la relation entre le monde de la recherche et l'industrie est justement de faire progressivement monter le niveau TRL des technologies issues de la recherche. Pour la recherche, c'est l'assurance de travailler pour une application dont le besoin est avéré. Pour l'industrie, c'est une capacité d'amélioration continue des produits et d'une diminution des coûts de conception et de fabrication.

Aujourd'hui, certaines méthodes CFD ont déjà atteint des niveaux TRL très élevés, et sont utilisées quotidiennement en bureaux d'études. En revanche, leur limites bornent encore aujourd'hui la capacité d'optimisation des systèmes industriels grâce aux méthodes CFD à TRL élevés. De plus, la complexification des systèmes, notamment liée aux contraintes environnementales, fait parfois apparaître de nouveaux problèmes de conception (instabilités de combustion, points chauds, nouveaux polluants, vibrations, etc), non reproductibles avec les méthodes CFD à TRL

3. Ce temps est la somme d'un temps de mise en donnée du calcul, qui fait généralement appel à des procédures complexes afin d'éviter l'introduction d'une erreur de paramètres d'entrée, et du temps de calculs sur ordinateur.

élevés. Des méthodes beaucoup plus précises, permettant de contourner ces limitations, sont parfois déjà disponibles dans la communauté scientifique, mais leur niveau TRL est encore trop bas, ce qui les rend encore inaccessibles à l'industrie pour deux raisons principales. Premièrement, elles nécessitent souvent un coût de calcul prohibitif pour l'industrie et un temps de retour trop long. Deuxièmement, elles ne font pas encore l'objet de procédures rigoureuses d'industrialisation, qui les rend notamment accessibles à un utilisateur non averti de toutes les subtilités de mise en donnée de calcul.

Le niveau de précision de la CFD haute fidélité accessible par l'industrie dans un futur proche, permet d'envisager d'une part, une optimisation encore plus poussée des systèmes, et d'autre part, l'étude de situations ou de points de fonctionnement non accessibles à l'expérience, du fait de conditions de vol trop compliquées à reproduire (givrage des ailes par exemple) ou de méthodes de mesure trop intrusives ... La quantité de données que l'on peut obtenir à partir d'une simulation prédictive est également bien plus importante que celle difficilement mesurée dans l'expérience, permettant d'orienter la conception des bruleurs. Dans ce cadre, une élévation progressive du niveau TRL des méthodes CFD haute fidélité est un travail que s'efforce de fournir conjointement chercheurs et industriels, auquel participe cette thèse.

L'objectif principal de cette thèse est donc d'étudier les régimes de combustion de spray afin de les simuler à l'aide d'un code CFD haute fidélité, majoritairement à destination d'applications de type industriel. Dans le chapitre suivant, on analysera en détail la physique de la combustion turbulente d'un spray en étudiant la littérature scientifique, ce qui permettra de définir plus précisément les objectifs de ce travail de recherche.

Chapitre 2

Interactions spray/combustion/turbulence

2.1 Introduction

La chambre de combustion du moteur est le lieu d'un écoulement turbulent, réactif et diphasique [1]. La combustion turbulente diphasique implique un très grand nombre de phénomènes physiques dans trois domaines principaux relativement distincts : les écoulements turbulents, les écoulements réactifs et les écoulements diphasiques avec changement de phase. Chacun de ces domaines fait l'objet de recherche depuis plus d'un siècle, laissant encore malgré tout de nombreuses questions ouvertes.

Dans la chambre de combustion, ces trois types d'écoulement sont couplés, ce qui introduit une complexité supplémentaire qu'il est possible d'apprécier grâce au schéma illustré en figure 2.1. En combustion monophasique (carburant sous forme gazeuse), la turbulence a deux effets principaux : les tourbillons qui composent la turbulence génèrent un fort mélange local des espèces gazeuses (Flèche 1), et modifient le comportement de la flamme, elle-même influencée par le cisaillement et l'étirement générés par l'écoulement (Flèche 2). La structure du mélange local entraine différents régimes de combustion (Flèche 3) [2]. L'introduction d'un spray dilué dans la chambre fait apparaître de nouvelles interactions. L'écoulement turbulent agit sur la dispersion des gouttes dans la chambre. Les gouttes agissent en retour sur la turbulence locale du fait de leur frottement avec le phase gazeuse (Flèche 4). Le carburant gazeux, issu de l'évaporation des gouttes, modifie la structure du mélange local (Flèche 5), ce qui a une influence sur le régime de combustion. Enfin, la combustion et le spray interagissent par des échanges thermiques et massiques intenses (Flèche 6). Tous ces phénomènes sont très fortement couplés et doivent être pris en compte simultanément pour saisir correctement la physique de la combustion turbulente diphasique.

1. deux phases : phase liquide, le spray, et phase gazeuse.
2. On peut notamment citer les deux principaux régimes [162] : la combustion pré-mélangée, pour laquelle oxydant et carburant gazeux sont pré-mélangés avant de bruler, et la combustion non-prémélangée (appelée aussi flamme de diffusion) pour laquelle carburant et oxydant sont séparés, et réagissent à l'interface entre les deux phases gazeuses.

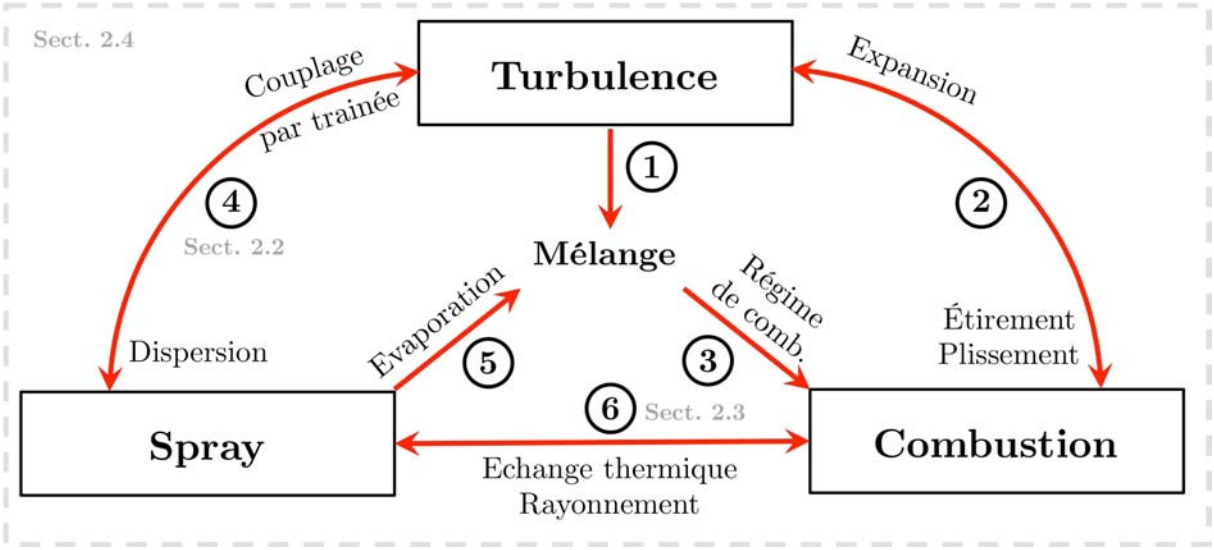

Figure 2.1 : *Schéma des différents domaines (cadres) et interactions (flèche) mis en jeux dans la physique d'un spray turbulent réactif.*

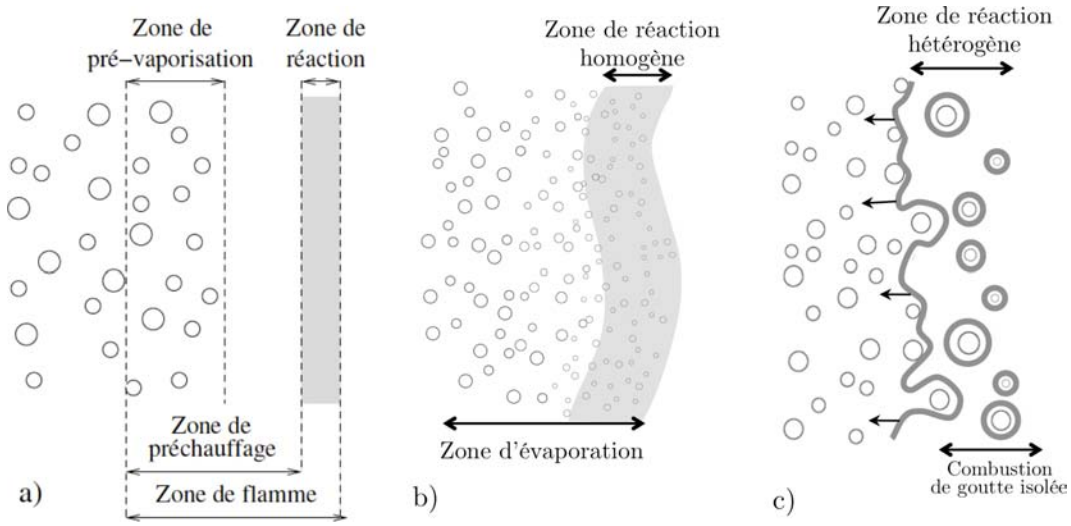

Figure 2.2 : *Schéma des différents niveaux d'interaction entre spray et combustion : a) Pre- évaporation, b) combustion diphasique homogène c) combustion diphasique hétérogène.*

L'interaction spray/combustion se caractérise aussi par une intensité particulière , qui diffère selon le cas d'étude. De manière schématique, on distingue trois niveaux d'interaction, illustrés en Fig. 2.2 :

a) Pré-évaporation : les gouttes liquides ont un temps suffisant pour s'évaporer avant d'atteindre la zone de réaction qu'elles alimentent en vapeur de carburant. Dans cette situation, les comportements du spray et de la combustion sont décorrélés spatialement.

b) Combustion diphasique homogène : le spray atteint la zone de réaction, et il est suffisamment dense et homogène pour alimenter un front de flamme continu. L'interaction entre le spray et la combustion est intermédiaire par rapport à une situation purement gazeuse.

c) Combustion diphasique hétérogène : la présence du spray dans la zone réactive modifie très fortement la structure locale de la flamme, notamment avec l'apparition de combustion de groupe de gouttes ou de gouttes isolées [3]. Dans cette situation, l'interaction entre le spray et la combustion est forte et les phénomènes physiques propres au spray et à la combustion ne peuvent pas être découplés.

Dans la suite, une revue de l'état de l'art, traitant des différentes interactions entre le spray, la combustion et la turbulence, est proposée (Fig. 2.1) : interaction entre un spray non réactif et la turbulence (Sect.2.2), interaction entre spray et combustion en régime laminaire (Sect. 2.3) et interaction spray/combustion/turbulence 2.4.

2.2 Interaction entre un spray non réactif et la turbulence

L'analyse fine de l'interaction entre un spray et un écoulement turbulent met en évidence des phénomènes spécifiques qui impactent la turbulence et la dispersion du spray. L'interaction mutuelle entre turbulence et spray est complexe et fait l'objet d'une recherche intensive, dont les principales conclusions sont reprises brièvement ci-dessous. L'analyse détaillée de l'état de l'art dans ce domaine, revu récemment dans [11], n'est pas abordée dans cette thèse, qui se concentre plutôt sur la combustion du spray.

2.2.1 Modulation de la turbulence

Du point de vue de la turbulence, la présence de gouttes module la structure locale de la turbulence. Cette modulation est la conséquence de plusieurs phénomènes opposés. D'une part, l'énergie cinétique turbulente diminue du fait du frottement à la surface des gouttes, qui dissipe un partie de l'énergie cinétique turbulente. D'autre part, l'intensité locale de la turbulence est augmentée par la formation de tourbillons dans le sillage d'une goutte et par le cisaillement au niveau de sa surface. Enfin, les gouttes ont tendance à accentuer l'anisotropie de la turbulence [24]. Chacun de ces phénomènes modifie à différentes échelles la distribution de l'énergie cinétique turbulente de l'écoulement par rapport au scénario classique de la cascade turbulente de Kolmogorov. L'intensité de cette modulation dépend essentiellement du chargement liquide local du spray et de la taille des gouttes. L'ensemble des cas expérimentaux, récemment revus par Poelma *et al.* [160], et des simulations numériques étudiant ce problème [11] ne permettent pas encore de classifier précisément les régimes et l'intensité de la modulation de la turbulence en fonction des caractéristiques du spray. En effet, la présence du spray a une double action compensatrice, en atténuant et en augmentant

3. établissement d'une flamme sphérique individuelle autour d'une seule goutte isolée

simultanément la turbulence, ce qui complique l'établissement d'une classification indépendante du cas étudié, auquel s'ajoutent les limites actuelles de la simulation numérique, détaillés plus loin.

2.2.2 Ségrégation préférentielle des gouttes

La principale conséquence de l'interaction spray/turbulence est la ségrégation préférentielle des gouttes, observée expérimentalement [83, 63] et numériquement [195, 67, 215, 24]. L'effet de la turbulence sur la trajectoire des gouttes peut être déterminé en fonction de leur nombre de Stokes $\mathcal{S}_t$, qui caractérise l'inertie de la goutte par rapport à la phase gazeuse turbulente :

$$\mathcal{S}_t = \frac{\tau_p}{\tau_g} \tag{2.1}$$

où τ_p est un temps caractéristique du comportement inertiel de la goutte et τ_g un temps caractéristique de la phase gazeuse. Les définitions du nombre de Stokes varient selon les études, mais dans la majorité des cas, τ_g correspond au temps caractéristique de l'échelle de Kolmogorov. Selon cette définition, pour des nombres de Stokes inférieurs à 1, les gouttes répondent très rapidement aux modulations de l'écoulement, et sont donc dispersées par la turbulence de la même manière que des traceurs fluides. Pour des nombres de Stokes supérieurs à 1, les gouttes ne sont influencées que par les grandes structures de l'écoulement, qui correspondent aux échelles intégrales de la turbulence, et ne subissent donc pas les petits tourbillons turbulents. Il existe un régime intermédiaire pour des nombre de Stokes proche de 1 pour lequel les structures turbulentes induisent un mouvement cohérent des gouttes, qui s'agglomèrent dans les zones de plus faible vorticité de l'écoulement [11] (Fig. 2.3).



Figure 2.3 : *Illustration de la ségrégation préférentielle des gouttes : image expérimentale d'une nappe laser traversant un spray de gouttes ayant un nombre de Stokes proche de 1, dans une turbulence homogène isotrope (tirée de [221]).*

2.2.3 Evaporation et mélange

La ségrégation préférentielle des gouttes par la turbulence a un effet direct sur la structure du mélange issu de l'évaporation du spray. Le mélange peut être fortement hétérogène, ce qui entraîne une variation importante et locale de vapeur de carburant, et donc de richesse. De plus, dans le cas de gouttes de taille significativement plus grande que l'échelle de Kolmogorov, les structure turbulentes agissent très localement à la surface de la goutte. L'amplification du mélange à la surface de la goutte modifie les processus responsables du changement de phase, en homogénéisant la température à la surface ou en déformant cette surface très localement. La littérature analysant l'influence de la turbulence sur le taux de transfert de masse et de chaleur d'une goutte fait l'objet d'une revue de Birouk et Gokalp [21].

2.2.4 Entrainement des gouttes - Filtre passe-haut

Dans une chambre de combustion, la vitesse relative entre les deux phases est générée par différents mécanismes d'intensité et de fréquence variables. En premier lieu, l'injection du liquide se fait généralement à très forte vitesse comparée à la vitesse gazeuse proche de l'injecteur, ce qui entraine une forte vitesse relative des gouttes dans cette région. Par ailleurs, les zones de cisaillement dans la chambre sont nombreuses, notamment proche des trous de dilutions (Fig. 1.3), générant de forts gradients de vitesse gazeuse, dont l'intensité et la direction restent stables dans le temps. Enfin, la turbulence locale entraîne des variations plus ou moins fortes de la vitesse fluide, à des échelles variées. Si les variations de vitesses gazeuses dans la chambre sont fortes, leur traduction en vitesse relative entre la goutte et l'écoulement n'est pas immédiate, puisque la goutte est entrainé par l'écoulement. En effet, du fait de la trainée de la goutte, la vitesse de la goutte tend vers la vitesse du gaz avec un temps de relaxation qui dépend de sa taille. Lorsque la vitesse gazeuse fluctue, la fréquence de la fluctuation peut être trop importante pour que la goutte ait le temps de répondre à cette fluctuation, qui se traduit alors par une fluctuation de vitesse relative. Les fluctuations très lentes de la vitesse gazeuse n'affecte pas le mode de combustion de la goutte car la vitesse de la goutte a le temps de s'adapter à la nouvelle vitesse gazeuse, entrainant un vitesse relative faible. La réponse dynamique d'une goutte à une fluctuation de vitesse gazeuse se comporte ainsi comme un filtre passe-haut [16], dont la fréquence de coupure augmente avec la taille de la goutte. La turbulence, qui entraine une variation haute fréquence de la vitesse gazeuse, est donc particulièrement susceptible d'avoir une influence sur le comportement dynamique et thermodynamique de la goutte, en faisant apparaître une vitesse relative fluctuante.

2.3 Interaction entre spray et combustion en régime laminaire

On analyse ici les phénomènes d'interaction spray/combustion en l'absence de turbulence, dans un premier temps sous l'angle élémentaire de la goutte isolée, puis dans un second temps sous l'angle du spray et des interactions collectives qui en résultent.

2.3.1 Combustion d'une goutte isolée

On considère une goutte de carburant volatile dans un environnement chaud et oxydant. Dans un premier temps, l'évaporation de cette goutte se met en place et transfère du carburant gazeux à l'environnement par diffusion. Après un certain temps, la présence d'un environnement oxydant chaud qui se mélange avec le carburant évaporé, peut activer une réaction locale autour de la goutte, à l'origine de la formation d'une flamme enveloppante. Ce phénomène est appelé *auto-allumage d'une goutte isolée* (Sect. 2.3.1.1). La flamme qui s'établit autour de la goutte influence fortement le taux d'évaporation et la durée de vie de la goutte (Sect. 2.3.1.2). Cette flamme locale peut être éteinte sous certaines conditions (Sect. 2.3.1.3).

2.3.1.1 Auto-allumage d'une goutte isolée

L'auto-allumage d'une goutte isolée peut être défini comme l'initiation d'une réaction exothermique rapide dans le mélange combustible au voisinage de la goutte. Ce phénomène doit être distingué des deux autres formes d'allumage de gouttes : *l'allumage forcé*, qui correspond à une initiation de la réaction locale par un dépôt locale d'énergie (claquage de bougie ou pointeur laser) et *l'allumage par propagation* d'une flamme initiée autour de gouttes voisines et détaillé en Sect. 2.3.2.

Comprendre les mécanismes qui pilotent l'auto-allumage d'un spray est important pour bien dimensionner un système de spray réactif. Dans l'industrie automobile par exemple, il est crucial de bien prédire le délai d'auto-allumage du mélange spray/oxydant chaud dans le piston, afin que le démarrage et la durée de la réaction soient bien synchronisés avec les mouvements du piston. De plus, certaines situations industrielles nécessitent d'éviter un auto-allumage spontané du spray. Prévenir les phénomènes de cliquetis dans les moteurs à piston en est une illustration : le cliquetis est l'apparition d'un dégagement de chaleur très fort par un auto-allumage prématuré du spray ou du mélange, lors de la remontée du piston, qui génère une surpression pouvant endommager le piston.

D'un point de vue scientifique, l'étude de l'allumage d'un spray est intéressante du fait de la richesse des processus fondamentaux mis en jeux, comme la cinétique chimique (à haute ou à basse température), la présence d'un changement de phase, les mécanismes de stabilisation et de propagation de la flamme. Ce phénomène fait ainsi l'objet de nombreux travaux expérimentaux et numériques, récemment revus par Aggarwal [3], dont les principales conclusions sont reprises ici.

L'auto-allumage du mélange autour d'une goutte est la combinaison de deux phénomènes simultanés. D'une part, la vapeur de carburant, dont la concentration est plus importante à la surface de la goutte, diffuse de la surface vers le milieu environnant. D'autre part, la différence de température et de concentration en oxydant, entre la surface de la goutte et le milieu environnant, crée un front de diffusion de l'environnement vers la goutte. C'est la rencontre de ces deux fronts de diffusion opposés qui crée un mélange potentiellement réactif. L'activité chimique commence à se mettre en place, en impliquant tout d'abord une combustion prémélangée. Les réactions qui dégagent beaucoup de chaleur sont progressivement initiées, ce qui génère une forte montée en température autour de la goutte et l'apparition d'un front de flamme non prémélangée une fois que le prémélange initial a complètement brulé. Le délai d'auto-allumage est défini comme le temps entre l'instant où la goutte est plongée dans l'environnement chaud et le moment où cette réaction rapide se met en place. Le délai d'auto-allumage peut être décomposé en un délai physique et un délai chimique. Le délai physique correspond au temps de préchauffage, d'évaporation et de diffusion du carburant, tandis que le délai chimique représente le temps nécessaire pour les réactions chimiques d'atteindre un emballement thermique.

Les travaux expérimentaux ont pour objectif principal de mesurer ce délai d'auto-allumage pour différents carburants et conditions environnantes. Deux systèmes expérimentaux sont couramment utilisés : une goutte maintenue au bout d'une fibre micrométrique et plongée dans un four préchauffé, et une goutte en chute libre dans un écoulement chaud. Généralement, ces expériences sont limitées à l'étude de grosses gouttes, de l'ordre du millimètre, du fait notamment des difficultés de mesure. De ce fait, les expériences doivent reproduire des conditions de micro-gravité afin d'éviter que les effets de convection naturelle, non négligeables dans le cas de gouttes millimétriques, biaisent les conclusions pour des gouttes de petite taille. La micro-gravité peut être obtenue dans le cas d'une goutte en chute libre par le biais d'une 'tour de chute', d'un vol parabolique *Zéro-G*, ou de manière beaucoup plus coûteuse à partir de la station spatiale internationale (ISS, campagne actuelle de mesure dans le cadre du projet FLEX [152, 69]). D'autres techniques de suspension de gouttes existent et tendent à limiter l'influence de la fibre sur les transferts thermiques et sur la forme de la goutte [145]. Les carburants étudiés sont essentiellement composés de n-alkane pur (heptane, iso-octane, dodecane...), avec des applications récentes sur des carburants multi-composants [132] et des biocarburants [136] .

A l'aide de ces dispositifs de mesure, une grande partie de la recherche expérimentale s'est concentrée sur l'analyse de l'auto-allumage de gouttes à basse température ($\sim$ 600 K - 1000 K), où certains carburants ont la particularité de présenter un délai d'auto-allumage gazeux qui n'évolue pas de manière strictement décroissante avec une augmentation de la température. Ces carburants présentent généralement deux principaux chemins réactionnels, l'un à basse température et l'autre à haute température. Entre ces deux régimes de températures, il existe une zone intermédiaire qui correspond à la transition entre ces deux chemins réactionnels, l'un prenant le pas sur le second, en consommant les espèces radicalaires permettant à l'autre de s'activer. Dans cette zone à relativement basse température, appelée zone NTC pour "Negative Temperature Coefficient", le

délai d'auto-allumage du mélange n'est plus décroissant de manière monotone avec une croissance de la température, voire peut croitre. Le comportement réactif qui apparait à basse température, est connu sous le nom de flamme "froide". La génération de cette flamme froide est une première étape dans l'auto-allumage et peut être suivie dans certain cas par l'établissement d'une flamme dite "chaude", comme illustré en Fig. 2.4 ("two-stage ignition").

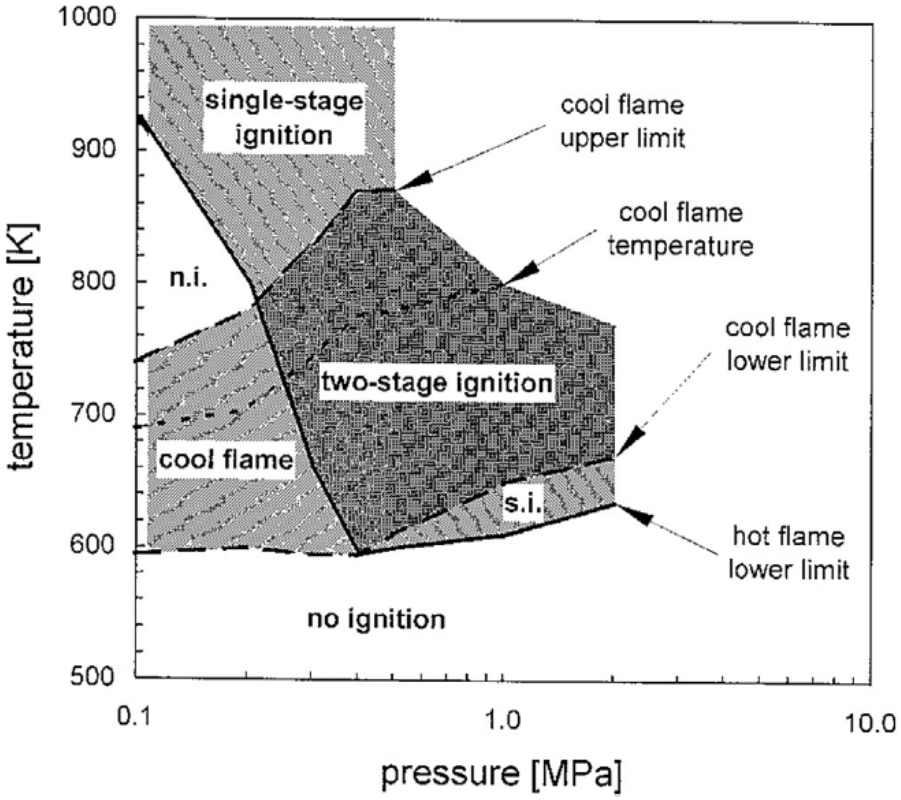

Figure 2.4 : *Régimes d'auto-allumage pour une goutte de n-heptane de diamètre initial de 0,7 mm (extrait de [227]). On distingue la zone "cool flame", qui correspond à l'apparition d'une flamme froide, la zone "two-stage ignition", qui correspond à l'apparition d'une flamme froide suivie d'une flamme chaude, et la zone "single-stage ignition" (apparition de la flamme chaude sans allumage "froid").*

Les premiers travaux analytiques et numériques sur l'auto-allumage font généralement une hypothèse de quasi-stationnarité de l'environnement gazeux autour de la goutte. Cette hypothèse revient à considérer que les conditions gazeuses autour de la goutte s'établissent infiniment rapidement par rapport au profil de température à l'intérieur de la goutte. L'évolution temporelle des conditions gazeuses de la goutte peut être ainsi considérée comme une suite d'états stationnaires. Cette approximation permet de dériver des modèles analytiques, qui fournissent un résultat très rapidement, pour une grande variation de conditions environnantes. Law *et al.* [123] construit un critère d'allumage basé sur un nombre de Damköhler [4] critique qui permet d'identifier si la goutte

4. Le nombre de Damköhler est un nombre sans dimension utilisé en cinétique chimique pour définir les conditions opérationnelles d'une réaction.

est effectivement allumé. Chen *et al.* [41] propose un modèle quasi-statique permettant de prédire facilement le délai d'auto-allumage d'une goutte. L'inconvénient de l'hypothèse quasi-statique est qu'elle surestime la quantité de carburant proche de la goutte en supposant une distribution de vapeur quasi-stationnaire [124, 41, 206]).

Afin de pallier aux limitations de l'approche quasi-stationnaire, une analyse instationnaire des équations d'évolution de l'environnement de la goutte est effectuée, mais nécessite de résoudre numériquement un système d'équations instationnaire fortement couplées. L'hypothèse d'une goutte sphérique permet généralement de réduire le problème à une seule dimension, ce qui permet notamment de concentrer les efforts de calculs sur une modélisation précise de la cinétique chimique. En effet, les mécanismes réactionnels qui provoquent l'auto-allumage d'un mélange font intervenir des espèces souvent minoritaires et ne subsistant que quelques fractions de secondes, mais qui sont indispensables pour l'initiation des réactions exothermiques majoritaires. Les études numériques dans la littérature se concentrent principalement sur la transition entre combustions prémélangée et non prémélangée [197], les effets d'accumulation instationnaire de carburant à l'intérieur de la flamme [102], les effets basse température avec auto-allumage en deux étapes [53, 152, 69], les carburants multi-espèces [198], et les conditions haute pression [6]. Chiu et Hu [44, 43, 101] ont fourni un travail théorique important permettant d'analyser finement les différents mécanismes instationnaires intervenant dans l'allumage d'une goutte.

L'une des principales observations tirées des études expérimentales et numériques est l'existence d'une taille de goutte optimale, qui correspond à un délai d'auto-allumage minimum, et d'une taille de goutte minimale en dessous de laquelle la goutte ne s'allume pas. Pour une goutte plus grande que l'optimum, le temps de préchauffage et de diffusion sont plus longs, ce qui entraîne une augmentation du délai d'auto-allumage. Pour une goutte plus petite que l'optimum, le délai d'auto-allumage peut devenir supérieur au temps de vie de la goutte, qui n'a donc plus le temps de s'allumer avant évaporation complète. Ces deux tailles caractéristiques diminuent lorsque la volatilité du carburant, ou lorsque la température et/ou la pression augmentent. Il existe également une température minimale en dessous de laquelle il n'est plus possible d'observer l'auto-allumage. Cette température décroit quand la pression, le diamètre initial et la volatilité du carburant augmentent.

L'étude de l'auto-allumage d'une goutte reste un sujet de recherche encore assez ouvert. Actuellement les travaux de recherche se concentrent sur l'interaction évaporation/turbulence, les effets haute pression et les carburants complexes.

2.3.1.2 Combustion d'une goutte isolée

2.3.1.2.1 Combustion en l'absence d'écoulement relatif entre la goutte et la phase gazeuse

En l'absence d'un écoulement relatif et après activation de la réaction dans l'environnement de la goutte, une flamme non-prémélangée sphérique s'établit autour de la goutte. Cette combustion de goutte isolée est un phénomène observé expérimentalement [143, 142], et constitue un cas de

référence pour la modélisation de la combustion diphasique. Les développements analytiques autour de ce phénomène de combustion de goutte isolée ont débuté il y a plus de 60 ans [194].

Les modèles analytiques les plus abordables sont obtenus en faisant deux hypothèses fortes :

- la température de la goutte est considérée uniforme, ce qui consiste à imposer une conductivité thermique liquide infinie. Cette hypothèse permet de s'affranchir de l'influence des profils de température à l'intérieur de la goutte.
- L'évolution des conditions gazeuses autour de la goutte est quasi-stationnaire par rapport à l'évolution de conditions à l'intérieur de la goutte. Cette hypothèse permet de considérer une résolution stationnaire de l'écoulement gazeux avec des conditions aux limites fixés.

A partir de ces hypothèses, un modèle quasi-statique de combustion de goutte isolée peut être obtenu [188, 121], et permet notamment d'obtenir l'évolution d'une goutte isolée en combustion avec une évaluation de son taux d'évaporation, du taux de transfert de chaleur à la goutte, du taux de dégagement de chaleur de la flamme, ainsi que le diamètre de la flamme et la température de flamme. Une dérivation de modèle analytique de combustion de goutte isolée est détaillée en Sect. 8.2.5 et n'est pas reprise ici. Le principal avantage de ces modèles quasi-statiques est d'être très faiblement coûteux en temps de calcul, ce qui en fait des candidats tout à fait adaptés à la simulation numérique d'un grand nombre de gouttes. Cependant, les deux hypothèses évoquées précédemment introduisent des erreurs non négligeables, notamment lorsque les effets instationnaires ne peuvent plus être négligés. Law *et al.* [124] montrent que l'approche quasi-statique surestime le diamètre de flamme et mésestime l'évolution du taux d'évaporation et du taux de dégagement de chaleur [124]. Ils proposent un modèle instationnaire plus coûteux mais améliorant significativement la prédiction de ces quantités par rapport aux données expérimentales. De même, Ulzama *et al.* [206] proposent une approche hybride quasi-stationnaire/instationnaire en incluant dans le modèle quasi-stationnaire, une résolution instationnaire de la diffusion de l'oxydant entre la flamme et l'environnement. Ce modèle est capable de reproduire les principaux effets instationnaires comme la variation du diamètre de flamme [124].

La configuration de la combustion de goutte isolée au repos fait l'objet d'un grand nombre d'études expérimentales. Les principaux dispositifs utilisés sont similaires à ceux utilisés pour l'auto-allumage d'une goutte isolée[90, 213, 132, 226, 12, 167]. En plus de fournir une base de validation pour les modèles analytiques et les simulations numériques, ces expériences mettent en évidence dans certains régimes, la présence d'une zone de formation de suies, qui est à l'origine d'un fort rayonnement et modifie le taux d'évaporation de la goutte [132, 12].

Parallèlement, la simulation numérique directe de la combustion d'une goutte isolée permet d'obtenir des informations détaillées sur les processus instationnaires. Awasthi *et al.* [7, 8] identifient différents régimes en fonction du diamètre initial des gouttes : les petites gouttes ($< 60\ \mu m$) présentent des effets instationnaires qui sont d'autant plus fort que le diamètre initial est petit, tandis que les grosses gouttes atteignent un état quasi-stationnaire mais sont soumises à des effets radiatifs qui augmentent avec le diamètre initial, ce qui influence le diamètre d'extinction. Cuoci *et al.* [53] étudient l'impact de la chimie basse température sur le taux d'évaporation. Dans une

plage de température basse ($\sim 600-900\ K$), le dégagement de chaleur de la flamme froide proche de la goutte augmente le taux d'évaporation et réduit de ce fait le temps de vie de la goutte.

2.3.1.2.2 *Impact de l'écoulement relatif entre les deux phases*

En présence d'un écoulement autour de la goutte, la flamme est d'autant moins sphérique que la vitesse relative entre le gaz et la goutte augmente. De plus, au delà d'une certaine vitesse relative, la réaction n'est plus suffisamment rapide pour se maintenir en amont de la goutte. La flamme se détache progressivement de la goutte et se stabilise dans le sillage de la goutte, comme illustré en Fig. 2.5. On obtient alors une flamme "sillage" ou "wake flame" en anglais, observée expérimentalement [15].

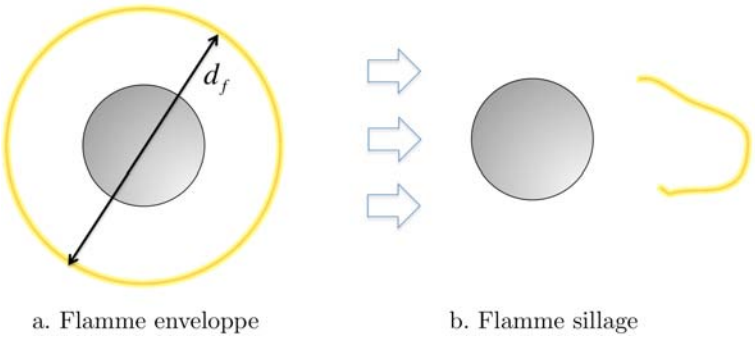

Figure 2.5 : *Schéma des deux modes de combustion de goutte isolée.*

La littérature s'intéresse en particulier à l'apparition de ces modes de combustion car il existe un lien entre mode de combustion de gouttes et émission de polluants [15]. En effet, lorsque la flamme se situe dans le sillage de la goutte, la combustion est principalement prémélangée, car le carburant est transporté par l'écoulement oxydant et se mélange avant la zone réactive. Les températures maximales atteintes dans la flamme sillage sont plus faibles que dans la flamme enveloppe, ce qui limite l'apparition d'oxydes d'azote (NO_x) [16] et diminue le taux d'évaporation et de combustion.

Comme évoqué en Sect. 2.2.4, si les variations de vitesses gazeuses dans la chambre sont fortes, leur impact sur la combustion d'une goutte est limité pour deux raisons. D'une part, la réponse dynamique d'une goutte à une fluctuation de vitesse gazeuse se comporte comme un filtre passe-haut [16] : seules les fluctuations rapides de vitesse gazeuse ne sont vues par la goutte. D'autre part, les fluctuations très rapides de la vitesse relative sont peu susceptibles d'affecter le mode de combustion, et ce du fait du comportement particulier des flammes non-prémélangées, qui se comporte comme des filtres passe-bas par rapport à la turbulence qui les impactent [162]. La conjonction de ces deux phénomènes limite l'influence de l'écoulement relatif et l'apparition de flammes sillages dans les chambres de combustion.

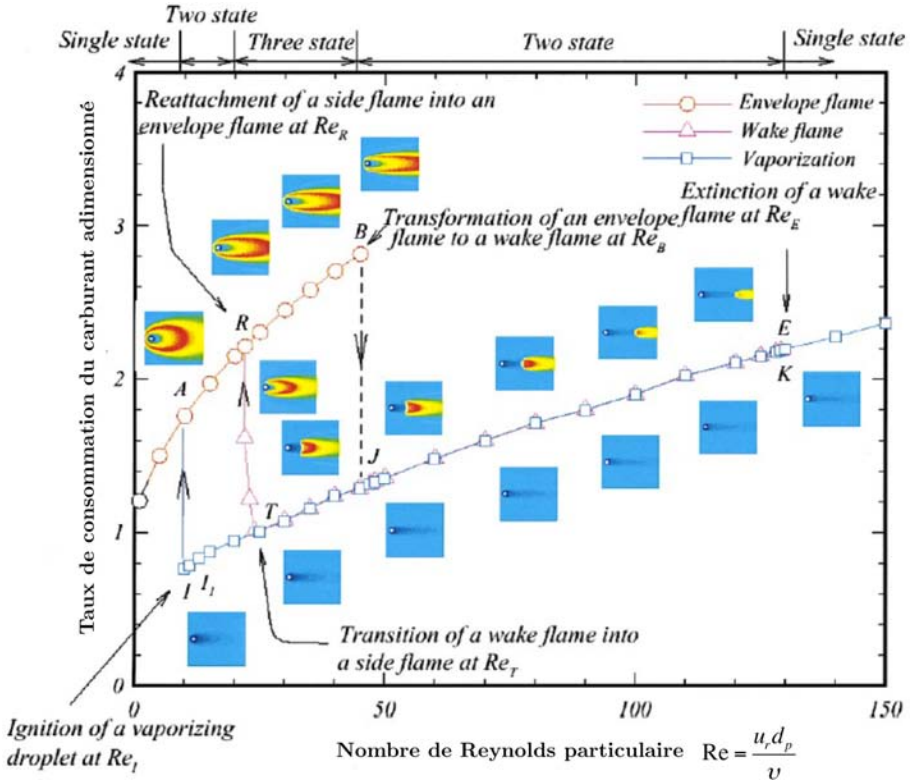

Figure 2.6 : *Diagramme multi-régimes d'une goutte dans un écoulement oxydant chaud, montrant les transitions entre les régimes et leur comportement d'hysteresis (extrait de [45])*

Le passage d'une flamme enveloppe à une flamme sillage a été étudié numériquement par plusieurs groupes, avec des premières études remontant aux années 80 [82, 62]. A l'aide d'une simulation directe d'une goutte isolée axi-symétrique dans un écoulement laminaire avec chimie simplifiée, le groupe de Chiu [107, 45, 99, 43] montre que le passage d'un mode à l'autre présente un comportement d'hysteresis (Fig. 2.6) : la vitesse relative à laquelle la transition enveloppe → sillage se fait est plus grande que celle observée pour le passage sillage → enveloppe. De plus, le taux d'évaporation d'une goutte en mode "sillage" est très proche du taux d'évaporation d'une goutte sans combustion, l'interaction entre la flamme et la goutte ne se faisant qu'en aval de cette dernière. A partir de ces observations numériques, les auteurs proposent un diagramme de régimes de combustion de gouttes (illustré pour un cas particulier de taille de goutte en Fig. 2.6), en fonction de la taille de la goutte et de la vitesse relative entre les deux phases. Ils construisent également une série de corrélations en fonction d'un nombre de Damkhöler qui permet d'évaluer numériquement la transition entre ces deux modes, ainsi que l'allumage et l'extinction, non détaillées ici [45].

Beck *et al.* [15, 16] analysent une situation équivalente, en introduisant une chimie complexe, ce qui permet d'analyser l'émission de polluants propre à chaque mode, et en introduisant une fluctuation de la vitesse d'entrée du gaz, ce qui permet d'obtenir la réponse du système à une variation

de vitesse relative et d'observer des transitions successives entre les deux modes de combustion. Wu *et al.* [222, 223] prennent en compte, dans leur simulation directe avec chimie réduite à 4 étapes, le fait que la vitesse de la goutte s'adapte progressivement à la vitesse du gaz, introduisant une variation dans la vitesse relative entre les deux phases. Cette subtilité supplémentaire permet d'obtenir l'évolution instationnaire de la combustion autour d'une goutte et permet d'observer qu'une goutte en mode sillage passe en mode enveloppe vers la fin de sa vie car la vitesse relative diminue du fait de la relaxation. Ils proposent aussi une corrélation basée sur un nombre de Damkhöler critique qui permet de déterminer la transition d'une flamme enveloppe vers une flamme sillage. Avec une chimie une étape, Liu *et al.* [131] se concentrent sur l'évolution d'une goutte dans un écoulement chaud, de son allumage à son extinction, en passant potentiellement par les deux modes de combustion de goutte. Le point d'auto-allumage se situe dans le sillage de la goutte, ce qui génère initialement une flamme sillage qui se transforme progressivement vers une flamme enveloppe si les conditions le permettent. Ils observent aussi vers la fin de la vie de la goutte, une transition vers une flamme sillage, voire un soufflage de la flamme, observé également par Pope *et al.* [163], avec chimie complexe.

2.3.1.3 Extinction d'une goutte isolée en combustion

La zone de réaction autour d'une goutte peut ne pas être maintenue dans tous les cas. Trois mécanismes principaux d'extinction en sont à l'origine [123, 34, 224, 53, 163]. Tout d'abord, une flamme enveloppe autour d'une grosse goutte ($D > 1mm$) peut s'éteindre à cause de pertes radiatives [34, 53]. Deuxièmement, la flamme peut être soufflée lorsque la convection relative devient trop importante [224, 163]. Enfin, pour de très petites gouttes ($D \sim 10\ \mu m$), la réaction peut ne plus être maintenue, puisque la chimie devient limitante devant les temps caractéristiques de diffusion des espèces et de température, qui décroissent comme le carré du diamètre de la goutte [224, 123].

La littérature se concentre sur la recherche de critères globaux permettant de définir en fonction des conditions environnantes, si la combustion de goutte isolée peut être maintenue. En l'absence d'écoulement, Law *et al.* [123] montre analytiquement grâce à une approche asymptotique liée au terme de réaction, qu'il existe un diamètre en dessous duquel la flamme enveloppe ne peut plus exister. Ce diamètre d'extinction est notamment indépendant du diamètre initial de la goutte. Cependant, un comportement propre au méthanol liquide est observé et a été longuement étudié [151, 7] : le diamètre d'extinction augmente avec le diamètre initial de la goutte de méthanol, ce qui n'est pas le cas pour d'autres carburants usuels. Ce phénomène est dû à la présence d'une grande quantité d'eau dans les produits d'oxydation du méthanol, qui favorise l'extinction de la flamme.

En présence d'un écoulement relatif entre les deux phases, un critère de soufflage de la flamme peut être établi, et dépend principalement de la vitesse relative. A partir d'une approche asymptotique similaire à [123], il est possible d'obtenir une estimation de la vitesse d'extinction, au delà de

laquelle la flamme ne peut plus se maintenir suffisamment près de la goutte [224, 163]. Bilger [18] s'appuie pour sa part sur une analogie géométrique entre la flamme non prémélangée sphérique et la flamme non prémélangée à écoulement contre-courant [156] pour lier la vitesse d'extinction à l'étirement d'extinction laminaire observé dans les flammes à contre courant. Enfin, Wu *et al.* [225] et Huang *et al.* [45] utilisent leur base de donnée de simulation directe de goutte isolée en combustion, pour obtenir une corrélation pour un nombre de Damkhöler critique correspondant à l'extinction de la goutte.

La construction d'un critère d'extinction utilisable en CFD est détaillée en Sect. 8.2.6.

2.3.2 Propagation d'une flamme dans un spray en régime laminaire

Lorsque l'on considère non plus une seule goutte isolée en combustion, mais le spray dilué dans son ensemble, une flamme peut se propager d'une goutte à une autre. Les mécanismes de propagation d'une flamme dans un nuage de gouttes sont variés, et introduisent une grande disparité dans l'intensité du couplage goutte/gaz, allant de la combustion homogène à la combustion hétérogène (Fig. 2.2). Trois configurations académiques sont principalement utilisées pour étudier ces mécanismes en régime laminaire [5, 190] :

- un train de gouttes ("streams" en anglais) correspond à un ensemble de gouttes monodisperses alignées et qui se suivent à intervalle régulier.
- une matrice de goutte ("array") correspond à un assemblage régulier de gouttes formées au croisement des fibres d'un maillage bidimensionnel ou tridimensionnel.
- une flamme à contre-courant diphasique correspond à un écoulement à contre-courant dans lequel la flamme alimentée par un spray peut se stabiliser facilement. Cette configuration permet notamment de faire des études paramétriques.

Ces configurations permettent d'observer les mécanismes de propagation de la flamme, d'analyser l'influence de différents paramètres sur les phénomènes ayant lieu à l'échelle de l'espace inter-gouttes, et de fournir des données expérimentales comme la vitesse de flamme diphasique.

2.3.2.1 Mécanisme de propagation de la flamme

Umemura *et al.* [208, 207] proposent une classification des différents types de propagation de flammes dans un spray, schématisée en Fig. 2.7 et obtenue à partir d'une configuration de train de gouttes. Elle caractérise les modes de propagation en fonction d'une température adimensionnée par la chaleur latente d'évaporation du carburant liquide L_v ($\mathfrak{R}$ est la constante des gaz parfaits), et de l'espace inter-gouttes S adimensionné par le diamètre de goutte. Elle pourrait être étendue à un spray polydisperse en considérant le diamètre moyen de goutte.

A haute température ($\mathfrak{R}T_\infty/L_v > 0,15$), les gouttes s'auto-allument individuellement, en formant des flammes enveloppes individuelles (grand espace inter-goutte) ou une seule flamme enveloppe collective (petit espace inter-goutte). A température plus basse ($\mathfrak{R}T_\infty/L_v < 0,15$), l'auto-

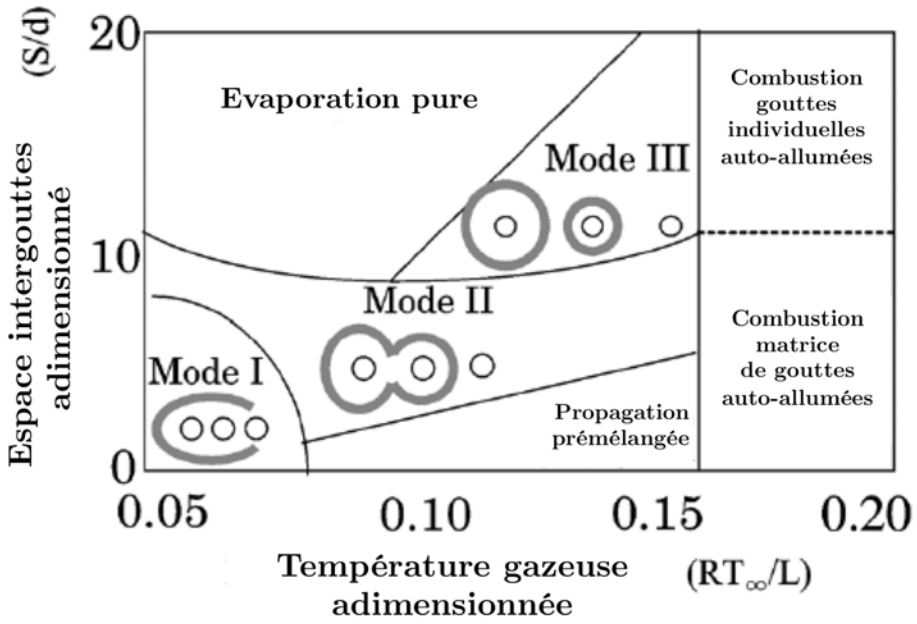

Figure 2.7 : *Carte de régimes de propagation inter-gouttes d'une flamme dans un nuage de gouttes (adaptée de [208]).*

allumage des gouttes n'a plus lieu et l'allumage ne se fait que par propagation d'une flamme entre les gouttes, faisant apparaître différents modes de propagation :

- **Propagation d'une combustion prémélangée homogène** ($S/d < 3$ et $0,07 < \Re T_\infty/L_v < 0,15$) : dans ce cas, les couches de vapeur de gouttes voisines se combinent en formant un mélange réactif continu à relativement faible température. Une flamme prémélangée peut alors se propager dans ce milieu continu à relativement faible vitesse, et entraine l'augmentation du taux d'évaporation dans son sillage. Cette propagation sous forme prémélangée est très proche d'une propagation de flamme prémélangée purement gazeuse, à laquelle s'ajoutent les effets de préchauffage et d'évaporation des gouttes. Par rapport à une situation purement gazeuse, la flamme diphasique homogène est généralement plus épaisse [26] et présente une vitesse laminaire pouvant être très différente, comme analysée en Sect. 2.3.2.2.
- **Mode I** : la température du milieu n'est plus suffisante pour permettre à un mélange air-vapeur suffisamment riche de se créer autour des gouttes et permettre une propagation de flamme prémélangée. Du fait du faible espace inter-goutte, la flamme enveloppe d'une goutte vient englober la goutte voisine froide la plus proche en augmentant fortement son évaporation. Cette goutte devient à son tour une nouvelle source de carburant qui permet au front de flamme non prémélangé d'atteindre les gouttes voisines. Ce mode de propagation apparait lorsque l'espace inter-gouttes est inférieur au diamètre de flamme maximal d'une goutte isolée en combustion. Le mode I entraîne la formation d'une flamme de diffusion englobant plusieurs gouttes.

- **Mode II** : Lorsque la distance inter-goutte augmente, la flamme enveloppe autour de la première goutte n'est pas suffisamment grande pour englober la goutte voisine. En revanche, sa proximité avec la goutte voisine active une combustion autour de la goutte. Le front de flamme de la première flamme sphérique peut se propager autour de la goutte voisine, et faire de même avec la gouttes suivante. La flamme résultante de ce mode de propagation est une flamme englobant plusieurs gouttes.
- **Mode III** : Lorsque la distance inter-goutte augmente davantage, la propagation de la flamme se fait par auto-allumage de la goutte voisine. Dans une expérience de train de goutte, Mikami *et al.* [143, 144] mettent bien en évidence le mécanisme qui permet la propagation dans ce mode (Fig. 2.8) : la proximité du front de flamme chauffe le mélange air-vapeur autour de la goutte voisine jusqu'à son auto-allumage. A partir du point d'allumage, une flamme triple (Fig. 2.9) se propage de part et d'autre de la goutte jusqu'à former une nouvelle flamme sphérique englobante. Les flammes sphériques restent distinctes dans ce mode de propagation par auto-allumage.
- **Pas de propagation** : Si l'énergie fournie par une goutte à sa voisine n'est pas suffisante pour permettre l'auto-allumage de la goutte voisine, la flamme ne peut pas se propager et les gouttes ne font que s'évaporer.

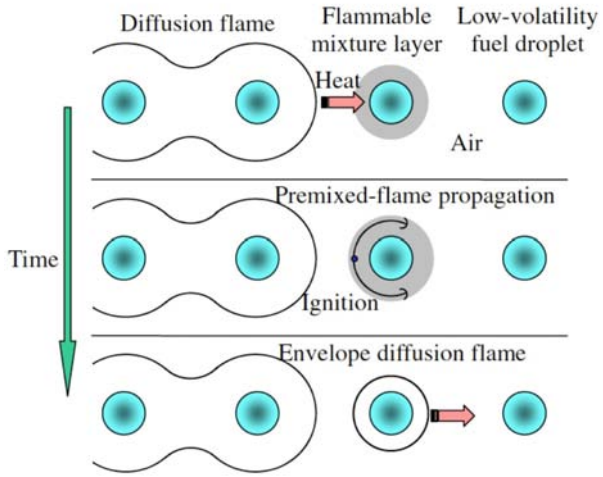

Figure 2.8 : *Schéma de la propagation d'une flamme dans un train de goutte (extrait de [144]).*

2.3.2.2 Vitesse laminaire de flamme diphasique

L'une des principales caractéristiques de la propagation que l'on cherche à obtenir est la vitesse laminaire de flamme diphasique, qui joue notamment un rôle dans la stabilisation de la flamme dans l'écoulement et la vitesse de consommation du mélange. Différentes méthodes de mesure de cette vitesse de flamme en présence de gouttes sont disponibles, principalement basées sur les méthodes

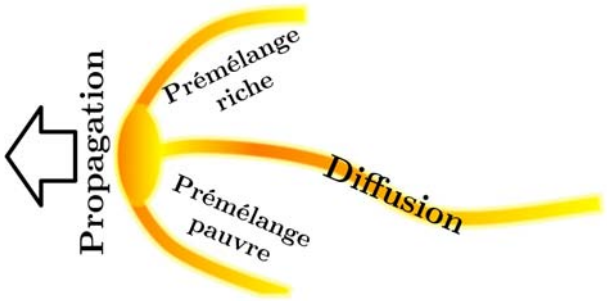

Figure 2.9 : *Structure d'une "flamme triple" purement gazeuse se propageant dans un mélange stratifié [162].*

de mesures développées pour la combustion gazeuse[207]. Cependant, elles ne distinguent pas les effets d'expansion volumique due à l'évaporation et qui varie en fonction du cas expérimental analysé.

Il existe des approches analytiques qui permettent d'estimer la vitesse de flamme diphasique. Par exemple, Greenberg *et al.* [85] proposent une formule qui permet d'obtenir la vitesse de propagation d'une flamme laminaire dans un spray hétérogène et polydisperse. Kaufmann *et al.* [113] dérivent par une approche unidimensionnelle la vitesse de consommation d'une flamme diphasique monodisperse, qui est similaire à une vitesse de consommation gazeuse à laquelle s'ajoute un terme lié à la richesse initiale stockée sous forme liquide.

Une partie de la recherche expérimentale se concentre sur l'étude de la propagation en combustion hétérogène, plus facilement accessible du fait des échelles spatiales concernées. Umemura *et al.* [207] observe expérimentalement l'existence d'une distance inter-gouttes seuil qui maximise la vitesse de propagation de la flamme. Elle est proche du diamètre maximum qu'aurait la flamme sphérique autour d'une goutte isolée dans les mêmes conditions. Mikami *et al.* [145] observe également que la vitesse de propagation dans les modes II et III est pilotée par le délai d'auto-allumage des gouttes composant le spray [145]. Un carburant ayant des délais d'auto-allumage de goutte plus rapides entraine une vitesse de propagation plus grande.

La simulation numérique permet d'estimer la vitesse laminaire de flamme diphasique en combustion homogène. C'est le cas par exemple de l'étude monodimensionnelle de propagation de flamme laminaire dans un train de goutte, avec une chimie détaillée, proposée par Neophytou *et al.* [153]. On distingue d'abord deux richesses. La richesse gazeuse correspond au rapport des concentration en carburant gazeux et en oxydant gazeux :

$$\Phi_g = s\frac{Y_F}{Y_{Ox.}} \tag{2.2}$$

où s est le coefficient stœchiométrique de la réaction, et Y_k la fraction massique de l'espèce k. La richesse liquide correspond à la richesse gazeuse qui serait obtenue après évaporation complète du liquide et s'écrit :

$$\Phi_l = s\frac{\rho_l \alpha_l}{\rho_g Y_{Ox}} \tag{2.3}$$

où $\rho_l \alpha_l$ correspond à la masse du liquide et $\rho_g Y_{Ox}$ la masse d'oxydant gazeux.

Neophytou *et al.* [153] montrent notamment que la vitesse de flamme est maximale quand la richesse dite "effective" du mélange gazeux est proche de 1. Cette richesse effective, analysée également par Réveillon *et al.* [170], est la richesse gazeuse à l'intérieur de la flamme diphasique. En amont de la flamme, la richesse gazeuse est quasi-nulle, le carburant étant essentiellement liquide. La richesse effective dans la flamme dépend du rapport entre un temps caractéristique de transfert entre richesse liquide Φ_l et gazeuse Φ_g, et un temps caractéristique de la flamme. Pour évaluer cette richesse effective, Réveillon *et al.* propose d'analyser le rapport $R_v = \tau_{evap}/\tau_c$, où τ_{evap} est le temps d'évaporation et τ_c le temps de pré-chauffage de la flamme qui correspond au temps de montée en température (rapport entre l'épaisseur thermique et la vitesse de la flamme purement gazeuse [162]). Un très court délai d'évaporation correspond à $R_v << 1$, c'est-à-dire à une disparition très rapide des gouttes dans le front de flamme et à une richesse effective égale à la richesse totale initiale $\Phi_{totale} = \Phi_g + \Phi_l$. A l'inverse, si $R_v >> 1$, la quantité d'oxydant diminue plus vite que l'apport en carburant. La richesse effective reste faible et entraîne une vitesse de flamme très faible. La vitesse de flamme peut également être accélérée par des effets chimiques locaux [153] ou par un effet d'expansion des gaz dû à l'évaporation, qui ajoute localement de la masse sous forme gazeuse, initialement sous forme liquide.

2.3.3 Régime de combustion du spray

Lorsque la densité du nuage de gouttes varie, différents régimes de combustion du spray sont observables. Chiu *et al.* [200, 42, 46] ont été les premiers à proposer une classification de ces modes de combustion, en analysant l'évolution d'une flamme qui se propage dans un nuage de gouttes plongé dans un environnement chaud. La dérivation du système d'équations quasi-statiques du nuage fait apparaitre le nombre adimensionnel G appelé *nombre de combustion de groupe*. Ce nombre G, dont la définition diffère selon les auteurs, peut être vu comme le rapport entre un temps caractéristique d'évaporation et un temps caractéristique de diffusion moléculaire (ou un temps de convection des gaz chauds dans le nuage). Lorsque le nombre de Peclet, qui correspond au rapport entre temps caractéristiques de transfert par convection et temps caractéristique de transfert par diffusion, est grand, Candel *et al.* [30] montrent que dans la plupart des cas, la relation $G \approx 5N^{2/3} d_f/S$ permet d'obtenir une valeur approchée du nombre de groupe. Cette relation fait intervenir le nombre total de gouttes du nuage N et la distance moyenne inter-gouttes S adimensionnée par le diamètre de flamme sphérique d'une goutte isolée d_f [114]. Le nombre G pilote le régime de combustion du spray.

La classification initiale proposée par Chiu a ensuite été largement complétée et adaptée pour différentes géométries de nuage, ainsi que pour prendre en compte l'influence de l'écoulement environnant en mouvement. La littérature vaste sur ce sujet est revue par Annamalai *et al.* [5]. Dans cette revue, une classification complète des régimes est proposée et reproduite en Figs. 2.10,

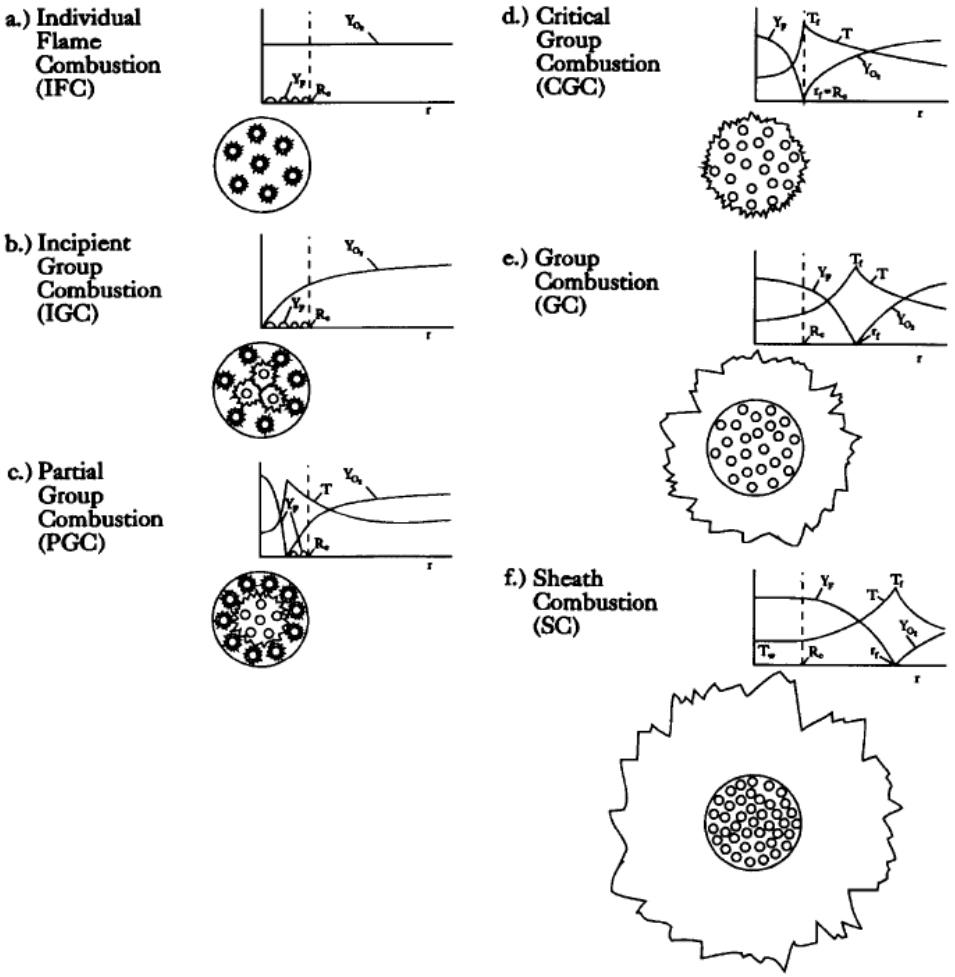

Figure 2.10 : *Classification et dénomination des régimes de combustion de groupe (extrait de [5]).*

2.11. Une transposition de ces régimes de combustion à un spray réel est également proposée en Fig. 2.12.

La situation a) en Fig. 2.10 correspond à une densité de nuage si faible que la chaleur diffuse jusqu'à auto-allumer les gouttes qui brulent alors individuellement. Les valeurs de G associées à ce régime sont inférieures à 0.01 (Fig. 2.11). L'apparition de combustion de goutte isolée a été mise en évidence expérimentalement [15, 143, 142]. Lorsque on augmente la densité, G augmente et fait apparaitre progressivement une combustion de groupe. Cette combustion est d'abord partielle (situation c. en Fig. 2.10) pour un nombre $G < 1$ (Fig. 2.11) : la flamme ne peut plus pénétrer dans le coeur du nuage, trop riche ou trop froid, mais se maintient à distance tout en étant alimentée par l'évaporation des gouttes internes. Si la densité augmente encore, on observe une combustion de groupe "complète" (situation e. en Fig. 2.10) pour un nombre $G < 10$. Dans le spray réel (Fig. 2.12), cette situation correspond à une zone en aval du coeur central du spray, après la transition,

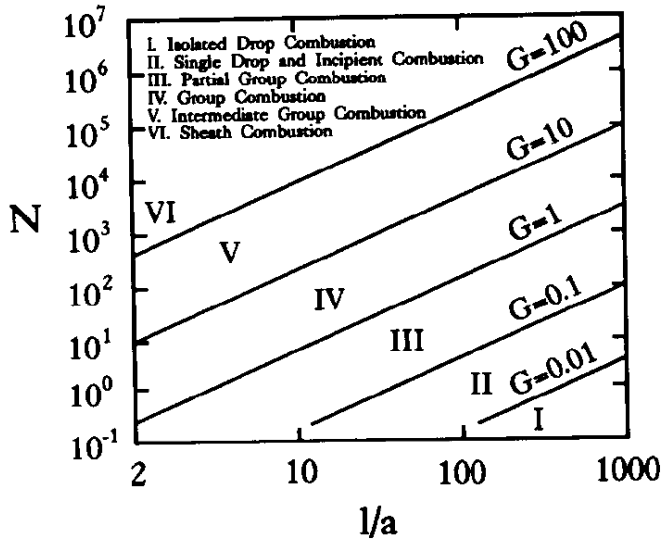

Figure 2.11 : *Diagramme des régimes de combustion de groupe (extrait de [5]).*

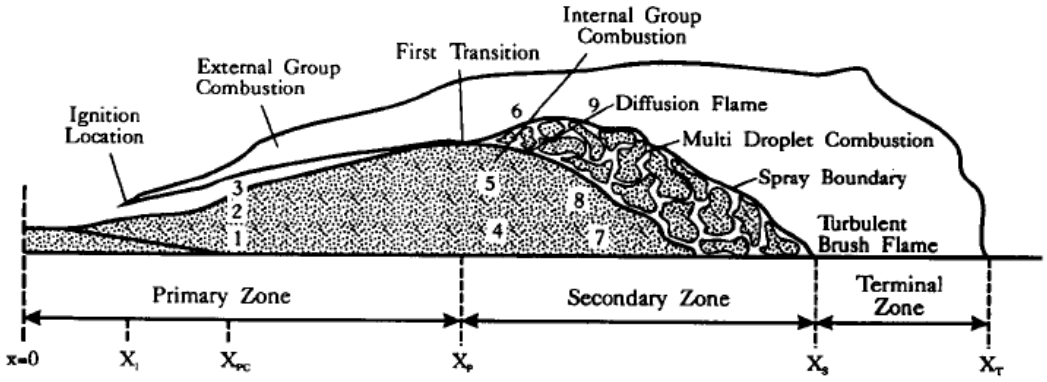

Figure 2.12 : *Schéma de la combustion autour d'un spray montrant différents régimes de combustion de groupe (extrait de [5]).*

pour laquelle on observe des poches de gouttes brulant individuellement. Pour des nombre de G supérieurs, des effets de saturation de vapeur au coeur du nuage peuvent apparaitre (situation f. en Fig. 2.10) : seule la couche externe du nuage peut s'évaporer et alimenter une flamme de diffusion externe. Dans le spray réel (Fig. 2.12), cette situation correspond à la combustion du coeur central du spray, entouré par une flamme de diffusion enveloppante, ne pouvant pénétrer à l'intérieur du spray. Des corrections et adaptations plus récentes sont proposées dans [27, 26, 209]. La combustion de groupe a été mise en évidence expérimentalement, parallèlement à une tentative de mesure du nombre de groupe afin de vérifier la théorie [40, 4].

Une autre approche d'analyse de ces régimes de combustion diphasique est proposée par Kerstein *et al.* [114] et Umemura *et al.* [208], et dénommée "théorie de percolation" en référence à une méthode similaire développée dans le domaine des milieux poreux. Dans cette théorie, la combustion de groupe est analysée sous l'angle de la capacité d'une flamme à se propager dans un nuage de gouttes et à activer tel ou tel régime de combustion, en comparant la distance inter-gouttes et le diamètre de la flamme enveloppante qui pourrait s'établir autour d'une des gouttes du nuage, dans les même conditions. Deux régimes de combustion de spray sont mis en évidence et correspondent à la situation a) et e) en Fig. 2.10. Umemura *et al.* [208, 207] proposent également une simulation numérique de la propagation d'une flamme dans un nuage non uniforme de gouttes polydisperses, qui se sert des critères de propagation inter-goutte obtenu dans la théorie de percolation, pour effectuer une étude paramétrique sur la vitesse de propagation et sur les comportements collectifs de combustion obtenus.

Enfin, la configuration de flamme diphasique à contre courant se prête bien à l'analyse de la structure de flamme diphasique homogène, en permettant de varier les régimes de combustion, soit en conditions prémélangées (injections opposées d'un mélange combustible d'une part et d'un gaz inerte d'autre part) ou non prémélangées (injections opposées du combustible d'une part et de l'oxydant d'autre part). D'un point de vue expérimental, de nombreux travaux sont disponibles [140, 142, 143, 144, 92]. En particulier, dans une configuration non prémélangée, Mercier *et al.* [142] observent la déformation de la flamme de diffusion par le passage d'une goutte, puis la formation d'une combustion de goutte isolée en aval. Dans une configuration prémélangée, Mikami *et al.* [143, 144] observent des mécanismes de propagation de la flamme, similaires à un train de goutte (Fig. 2.8 b.). D'un point de vue analytique, Greenberg *et al.* [128] développent une théorie asymptotique permettant d'obtenir une solution analytique du problème. D'un point de vue numérique, Gutheil *et al.* [86, 87] effectuent des simulations 1D avec chimie détaillée et prise de compte de la phase liquide, et observent des structures de flammes généralement plus complexes que les structures gazeuses usuelles, avec de multiples zones de réactions, des effets d'accumulation par ralentissement voire inversion de la direction du spray dans l'écoulement contre-courant etc. Le groupe de Nakamura *et al.* [122, 149, 217, 216] effectue de nombreuses simulations 2D d'une configuration contre-courant, qui permettent d'observer les régimes de combustion de part et d'autre de l'axe. Ils observent notamment différents modes de combustion de gouttes, collectifs ou individuels, de multiples zones de réactions non prémélangées et prémélangées au sein d'une même configuration et la formation de suies.

2.4 Etude d'un spray turbulent réactif

Dans cette partie, l'interaction d'un écoulement turbulent avec un spray réactif est étudiée. En effet, une compréhension profonde des mécanismes d'interaction entre ces trois phénomènes est nécessaire afin d'optimiser les systèmes actuels. La structure de la flamme, les mécanismes de

stabilisation, d'allumage et d'extinction d'une flamme diphasique sont encore mal compris dans la grande variété des applications de spray liquide plongé dans un écoulement turbulent réactif.

Historiquement dans la littérature, des expériences de complexité croissante ont été mises en place avec les objectifs suivants : mieux comprendre les mécanismes physiques du couplage spray/combustion/turbulence et fournir une base de données pour la validation des modèles numériques. En parallèle, des simulations numériques haute-fidélité ont été réalisées afin de fournir des modèles numériques fiables. Ces simulations sont utilisées pour valider les modèles simplifiés et mieux comprendre les mécanismes physiques non accessibles par expérience.

Dans un premier temps, quelques dispositifs expérimentaux relativement proches de la configuration industrielle de référence (la chambre de combustion d'hélicoptère) sont présentés. Dans un deuxième temps, les méthodes numériques actuelles les plus répandues de simulation d'un spray turbulent réactif sont brièvement décrites.

2.4.1 Caractérisation expérimentales d'un spray turbulent réactif

2.4.1.1 Techniques de mesures des sprays réactifs

La présence d'un spray liquide pose des difficultés supplémentaires aux expérimentateurs. En effet, lorsque les méthodes classiques de mesures optiques non intrusives pour les écoulements gazeux sont utilisées, une forte atténuation du signal, une diffusion spatiale du pointeur laser, ainsi que des interférences liées à la présence de gouttes liquides perturbent fortement la qualité de la mesure. De plus, dans un expérience de spray diphasique réactif, une mesure simultanée des propriétés de la phase liquide et de la phase gazeuse est souhaitable, si possible de manière non intrusive. Du fait de la grande taille des dispositifs de mesure par rapport à la taille des accès optiques, les techniques de mesure sont malheureusement mises en oeuvre l'une après l'autre la plupart du temps. A cela s'ajoute la difficulté et le coût associé aux expériences opérant à des pressions équivalentes aux conditions d'entrées dans les chambres de combustion industrielles. En effet, le coût d'une expérience augmente très fortement avec la pression interne recherchée dans l'expérience et les accès optiques deviennent également plus difficiles. Cela explique en grande partie la difficulté à réaliser des expériences pleinement représentatives du système industriel de référence qui soient instrumentée convenablement.

Pour la phase gazeuse, les méthodes de mesures sont similaires au cas purement gazeux, avec certaines précautions d'emplois du fait de la présence du spray. Les techniques de "Laser Doppler Anymometry" (LDA) ou de "Particle Image Velocimetry" (PIV) sont utilisées pour mesurer le champs des vitesses gazeuses, de manière ponctuelle pour la LDA ou dans un plan pour la PIV [74]. Ces deux techniques s'appuient sur un ensemencement de l'écoulement en très petites particules dont le nombre de Stokes est très petit devant l'unité, ce qui permet de considérer que les particules sont en équilibre avec l'écoulement, et donc que leur vitesse est représentative de la vitesse locale

de l'écoulement. La mesure de vitesse est réalisée grâce à l'effet Doppler optique pour la LDA, et par superposition et traitement de deux clichés très proches en temps pour la PIV.

Une technique répandue de mesure de la température gazeuse s'appuie sur la diffusion Raman anti-Stokes cohérente ("CARS" en anglais). Cette technique n'est malheureusement pas utilisable dans les zones de spray du fait des interférences générées par les gouttes. Afin de mesurer la concentration locale d'espèces et la température, une autre technique répandue s'appuie sur le phénomène de fluorescence induite par laser ("LIF" en anglais), qui permet d'évaluer la présence de certaines espèces en analysant le spectre ré-émis par le milieu gazeux. De ces techniques, il est également possible de déduire la température locale lorsque le spectre d'émission d'une de ces espèces en particulier est clairement observable. De même, il est possible d'observer le phénomène d'évaporation par une LIF sur la vapeur de carburant ou sur un composé additif fluorescent qui est préalablement ajouté au carburant et ressort nettement sur l'image LIF obtenue. Dans le spray, la température moyenne locale peut être obtenue grâce à une LIF sur l'espèce NO ("multi-line NO-LIF" [119]). Enfin, la mesure du radical OH par LIF permet d'identifier les zones d'allumage et la position du front de flamme, car le radical OH est présent à l'initialisation de la réaction d'oxydation du carburant et sa présence est très localisée dans les zones de réaction.

Afin d'obtenir les propriétés locales de la phase liquide, la technique "Phase Doppler Anemometry" (PDA) permet d'obtenir, en un point, le diamètre de goutte, ainsi qu'une composante de la vitesse de cette goutte [74]. En combinant plusieurs systèmes PDA placés sur différents axes, il est possible d'obtenir l'ensemble des composantes de la vitesse des particules. Dans le cas d'un utilisation conjointe d'une PIV/LDA pour le gaz avec un système PDA pour les gouttes, il est généralement possible de distinguer les particules d'ensemencement, très petites, des gouttes liquides du spray, généralement plus grosses. La différence de taille entre particules d'ensemencement et gouttes n'est malheureusement pas toujours vérifiée, ce qui rend cette technique inadéquate dans les zones de spray. La présence de gouttes peut également être évaluée dans un plan en s'appuyant sur la diffusion de Mie ("Mie scattering"). De manière similaire, la méthode 'Interpherometric Laser Imaging Droplet Sizing' (ILIDS ou LIDS) permet de mesurer le diamètre et une composante de la vitesse des gouttes mais dans un plan complet, par mesure des franges d'interférences générées par la réfraction d'une nappe laser au passage d'une goutte. En revanche, les autres propriétés des gouttes liquides sont plus difficilement mesurables. Les techniques de mesures associées sont beaucoup moins usuelles. Pour citer deux exemples, la mesure de température des gouttes peut s'obtenir par une LIF à deux couleurs, ou par une "Global Rainbow technique" (GRT [129]). L'amélioration des techniques de mesure de la phase liquide fait l'objet d'une recherche très approfondie.

2.4.1.2 Expériences de spray réactif turbulent

Afin de dimensionner une expérience de spray réactif turbulent opérant à un régime voulu, Delabroy *et al.* [57] définit grâce à une analyse dimensionnelle de la combustion d'un brouillard

de goutte, quatre nombres adimensionnelles, qui décrivent les grands processus de la combustion turbulente d'un spray :

- $\Delta_1 = L_{liquide}/L_{ent}$, qui compare une estimation de la longueur du coeur dense du spray liquide $L_{liquide}$ et de la longueur d'entrainement L_{ent} de l'air par ce spray. Ce nombre décrit l'aspect global de la flamme.
- $\Delta_2 = \tau_{mix}/\tau_{ch}$, qui compare un temps de mélange turbulent τ_{mix} à un temps caractéristique de la chimie τ_{ch}. Ce nombre décrit la capacité de la flamme à se stabiliser.
- $\Delta_3 = \tau_{evap.}/\tau_{ch}$, qui compare une estimation du temps de vie de la goutte $\tau_{evap.}$ au temps caractéristique de la chimie τ_{ch}. Ce nombre complète l'information de Δ_2 pour prendre en compte le délai lié à l'évaporation.
- $\Delta_4 = d_{SMD}/d_{inj}$ qui compare le diamètre moyen de Sauter (SMD) d_{SMD} des gouttes à l'injection au diamètre de l'injecteur d_{inj} et caractérise le rendement d'atomisation.

La pertinence de ces quatres nombres est validée dans plusieurs configurations expérimentales. Ces nombres permettent d'anticiper la structure globale de la flamme, son mode de stabilisation et le rôle que jouent les gouttes dans la stabilisation de la flamme. Ils permettent notamment d'effectuer des changements d'échelles et d'établir des règles de similitude. Enfin, ils permettent d'établir une autre méthode de classification de combustion diphasique.

Dans la suite, quelques travaux expérimentaux de spray réactif turbulent sont résumés et classés selon le mode de stabilisation de la flamme.

2.4.1.2.1 Stabilisation naturelle de la flamme dans un écoulement non recirculant

Dans cette configuration, la flamme dite détachée ("lifted flame" en anglais) se stabilise naturellement dans un écoulement non recirculant, ce qui la rend très sensible aux fluctuations de la vitesse du gaz en entrée.

Marley *et al.* [139, 138] et Ge *et al.* [77] étudient une flamme détachée qui se stabilise en aval d'un spray conique, plongé dans un écoulement coaxial (Fig. 2.13). Les diagnostics expérimentaux permettent de suivre l'évolution du point de la flamme le plus en amont dans l'écoulement, appelé "pied de flamme" ("leading edge flamme" en anglais). Ce dernier montre une structure à deux fronts relativement similaire à une flamme triple (Fig. 2.9). Une ségrégation préférentielle des gouttes est également observée et semble jouer un rôle important dans la structure de cette flamme : les structures turbulentes centrifugent les grosses gouttes en périphérie du spray tout en se chargeant de petites gouttes, ce qui entraine une fort transfert massique local et un mélange rapide avec l'oxydant. Le mélange ainsi généré est suffisamment riche pour stabiliser un flamme prémélangée. Les grosses gouttes centrifugées sont responsables de la création d'une flamme non prémélangée en aval de l'écoulement, qui s'attache en aval de la première flamme prémélangée. Cette structure, formée d'une imbrication de modes de combustion multiples, est typique d'un spray réactif.

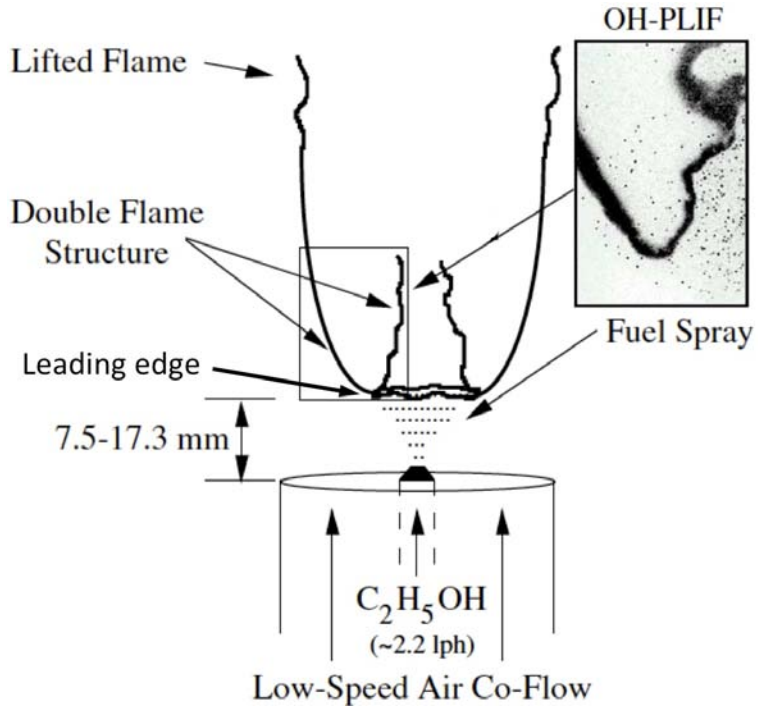

Figure 2.13 : *Schéma de l'expérience de Marley et al. (adapté de [139]).*

2.4.1.2.2 Stabilisation par une flamme pilote

Dans cette configuration, la flamme principale est stabilisée à l'aide d'une toute petite flamme, appelée "flamme pilote", généralement de gazeuse et prémélangée, qui active en continu la réaction dans le mélange combustible froid entrant.

Pichard *et al.* [159] étudient un brûleur à prémélange pauvre et stratifié (technologie LPP pour "Lean Pre-vaporized Premixed") qui consiste en un spray conique injecté au centre d'un tube cylindrique, entouré d'une jet co-axial d'air turbulent. Dans cette expérience, le taux de prévaporisation est variable. Les auteurs montrent notamment que le degré de prévaporisation croît quand la température d'entrée et la volatilité du carburant augmentent, et quand la richesse globale et le diamètre moyen d'injection diminuent. Akamatsu *et al.* [4] étudient une flamme-jet, composée d'un écoulement central d'air et de gouttes entourées d'un écoulement d'air. Ils étudient le comportement de la flamme en se référant à la théorie de combustion de groupe, en évaluant la valeur du nombre G. Karpetis *et al.* [112] étudient une configuration similaire, qui permet notamment d'observer finement les effets de couplage entre phase liquide et écoulement gazeux, ainsi que la ségrégation préférentielle des gouttes. Très récemment, Gounder *et al.* [84, 118] étudient un brûleur académique très bien instrumenté, qui est alimenté par un spray caractérisé précisément, généré par un atomiseur ultrasonique et intégré dans un écoulement turbulent d'air. La flamme est aussi stabilisée par une flamme pilote. Cette configuration est particulièrement bien

adaptée pour la validation des codes numériques. De même, l'influence de la volatilité du carburant, de la vitesse de l'écoulement d'entrainement, de la taille des gouttes et de la dispersion turbulente est analysée.

2.4.1.2.3 Stabilisation par recirculation des gaz brulés

Dans cette configuration, la stabilisation de la flamme est assurée par un écoulement recirculant, obtenu par une entrée d'air en rotation. Les recirculations de gaz chauds assurent une activation de la réaction du mélange combustible froid. Les configurations industrielles utilisent en général ce mode de stabilisation.

Widmann et Presser [218, 166] étudient les propriétés d'un cône creux plongé dans un écoulement turbulent giratoire d'air, dans une chambre de combustion fermée. Un attention particulière est portée sur la définition des conditions aux limites, afin de permettre une validation des codes de calculs. Les auteurs fournissent une base de données très complète. Lecourt *et al.* [176] étudient une chambre pressurisée appelée "Mercato", très similaire à une chambre de combustion aéronautique. Marchione *et al.* [137] étudient un brûleur confiné afin d'analyser les processus stochastiques d'allumage dans une configuration avec spray. Une configuration similaire est étudiée par Cavaliere *et al.* [32] afin d'analyser les différentes structures de flammes en présence ou en l'absence du spray, et les mécanismes d'extinction de la flamme en particulier. Les différents régimes de combustion sont analysés par des mesures combinées de position de flamme, de phase liquide et d'écoulement, ce qui permet une comparaison avec la simulation numérique. L'ensemble de ces expériences montre l'influence tout à fait importante du spray sur la structure de flamme.

2.4.2 Simulations numériques d'un spray turbulent réactif

La résolution numérique simultanée de la combustion, de la turbulence et du spray dans une configuration complexe est une tache très délicate, du fait du nombre de phénomènes physiques mis en jeux, de l'étendue de leur échelles spatiales et temporelles, comme illustré par les expériences de combustion turbulente d'un spray. Dans cette partie, les apports récents dans le domaine de la modélisation des sprays turbulents réactifs sont décrits pour les approches DNS et LES. Les nombreux travaux réalisés dans le formalisme RANS ne sont pas présentés ici.

2.4.2.1 Approche "DNS"

On appelle simulation numérique directe ('Direct numerical simulation' DNS) une résolution de l'ensemble des échelles composant les phénomènes physiques mis en jeux. Dans le cadre d'un spray réactif turbulent, cela implique de bien résoudre :

1. l'ensemble des tourbillons de la turbulence,

2. chaque goutte individuelle composant le spray, avec les variations internes à la goutte, les échanges à la surface.
3. la cinétique chimique, en termes de résolution spatiale et de comportements globaux.

Du fait de son coût de calcul, les approches DNS qui sont capable de prendre parfaitement en compte ces trois niveaux de fidélité, ne sont envisageable que sur des problèmes de toute petite taille et pour un nombre restreint de gouttes. Pour donner un ordre d'idée, et en ne considérant qu'une cinétique chimique réduite, sachant qu'un secteur de chambre de combustion [5] correspond environ à un volume de $10^{-6}\,m^3$, et que l'échelle la plus petite à résoudre et de l'ordre du dixième de micromètre, il faut environ 10^{15} points de maillage pour envisager une résolution DNS d'une chambre de combustion d'hélicoptère. Actuellement, les maillages les plus gros approchent les 10^{11} points de maillage et le calcul de 10^{15} points de maillage de façon standard n'est pas envisageable avant quelques décennies, au vu de la croissance actuelle des moyens de calcul.

Cependant, des approches DNS approximatives, ne prenant fidèlement en compte que deux des trois niveaux de résolution évoqués précédemment, font aujourd'hui l'objet de travaux de recherche et consiste en des "expériences numériques" permettant de comprendre dans les détails les phénomènes physiques de petite échelle, non accessible à l'expérience, et permettant de valider des modèles simplifiées. Généralement, les équations de la mécanique des fluides sont résolues séparément dans les deux phases (liquide et gazeuse) séparées par une interface considérée d'épaisseur nulle, dont la trajectoire est suivie par une méthode numérique appropriée [96, 158, 97]. Quelques travaux récents sont cités dans la suite.

Dans un cas non évaporant, Ulhmann [205] démontre la faisabilité d'une méthode de conditions aux limites immergées ("Immersed Boundary Method") en simulant la trajectoire de 1000 gouttes sphériques. Dans un cas non-réactif mais évaporant, Duret *et al.* [61] étudient une DNS de Turbulence Homogène Isotrope (THI) avec quelques gouttes, localisées par une méthode de suivi d'interface, permettant d'analyser l'influence très locale de la turbulence sur l'évaporation. A l'aide d'une cinétique chimique simplifiée, Zoby *et al.* [228, 229] parviennent à étudier l'évaporation et la réaction d'une matrice de quelques gouttes dans un écoulement turbulent, grâce à une méthode couplée "Level-set/Ghost fluid method". Leur étude permet de comparer les taux d'évaporation des gouttes avec les prédictions des modèles d'évaporation usuels. Elle montre notamment que la loi "1/3-2/3" communément utilisée pour déterminer les conditions de diffusion thermique et massique dans les modèles d'évaporation entraine une sous-estimation du taux d'évaporation d'un facteur deux dans les zones chaudes.

2.4.2.2 Approche "DNS-DPS"

En l'absence de capacité de calcul permettant de résoudre l'écoulement à l'intérieur et au voisinage de chaque goutte, une approche lagrangienne déterministe de suivi des gouttes peut être

5. fraction angulaire de la chambre de combustion totale

envisagée pour résoudre de manière simplifiée la phase liquide, qui sera couplé à une résolution DNS de la phase gazeuse. L'approche lagrangienne déterministe ('Discrete Particle Simulation' DPS) consiste à considérer les gouttes comme des points-sources par rapport au gaz, c'est-à-dire des points matériels qui se déplacent dans l'espace en étant, dans le même temps, source locale de carburant gazeux. Elle implique les hypothèses suivantes :

- Le spray est dilué, c'est-à-dire que le volume occupé par le liquide et les collisions entre les gouttes sont négligeables. De plus, les interactions sans contact entre gouttes voisines doivent être suffisamment faibles.
- Le diamètre de goutte doit être suffisamment petit devant l'échelle de Kolmogorov, taille du plus petit tourbillon avant dissipation visqueuse. Cette hypothèse contraint fortement les tailles de gouttes accessibles par ces approches DNS-DPS.

L'évolution de la trajectoire, du rayon et de la température de la goutte point-source est obtenue grâce à des modèles macroscopiques analytiques et/ou empiriques de trainée et d'évaporation (évoquées plus loin en Chap. 4.2), très peu couteux en temps de calculs.

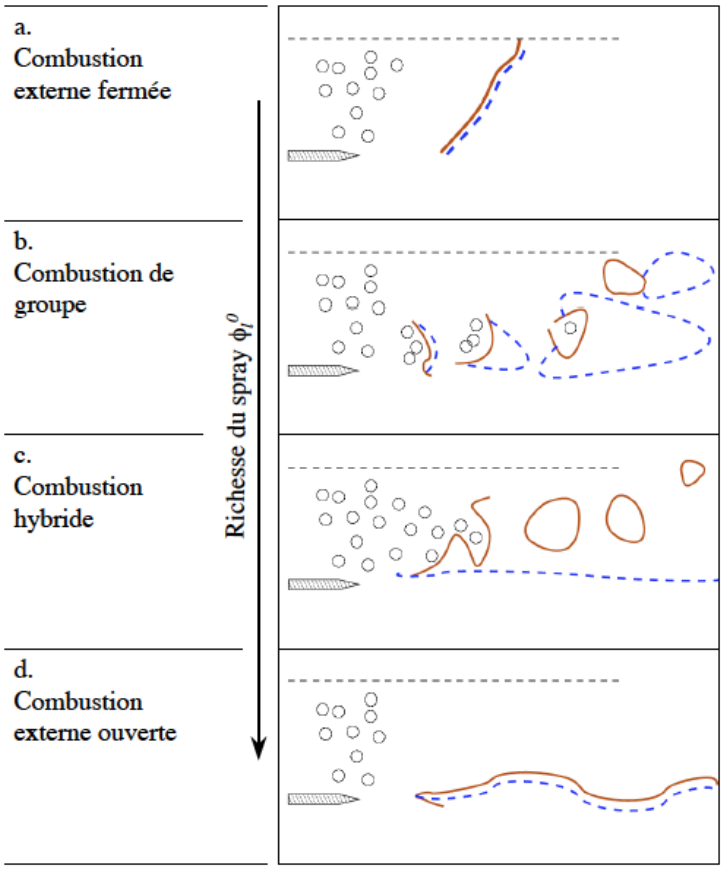

Figure 2.14 : *Régimes de combustion diphasique turbulente en fonction de la richesse du spray [172] (extrait de [22]). Trait continu : prémélange, Trait pointillé : diffusion*

Les premières études DNS-DPS ont été réalisées dans des domaines 2D. Une des limites de ces approches est que la turbulence 2D simulée dans ces configurations ne rend pas complètement compte d'une vraie turbulence, intrinsèquement 3D. Ces études ont tout de même permis de mettre en évidence les principaux mécanismes de la combustion turbulente diphasique. Réveillon et Vervisch [172] proposent une première approche novatrice, en réduisant l'ensemble des caractéristiques du spray évaporant à deux paramètres (la richesse liquide et la densité de gouttes injectées) en utilisant un cinétique chimique réduite. La configuration choisie de jet central chargé en gouttes entouré de deux nappes d'air, permet d'obtenir une gamme variée de structures de flammes diphasiques, qui peuvent être organisées en trois catégories principales, elles-mêmes sous-divisées en sous-groupes (Fig. 2.14) :

1. **combustion externe** : le front de flamme reste continu dans ce régime. Deux sous-régimes peuvent être observés, en fonction de la position du front de flamme :
   - un régime dit "externe fermé" lorsqu'un front de flamme unique, principalement prémélangé, parvient à se stabiliser dans l'écoulement en enveloppant les gouttes et la vapeur de carburant pré-évaporé en amont du front de flamme (Fig 2.14 a.).
   - Un régime dit " externe ouvert", lorsque deux zones de réactions se développent de part et d'autre du jet central de gouttes, similairement à l'expérience de Marley *et al.* évoqué précédemment [139] (Fig. 2.14 d.)
2. **combustion de groupe** : les gouttes s'organisent en plusieurs groupes consommés par des flammes indépendantes. Des régimes de combustion prémélangés et non prémélangés sont simultanément observables (Fig 2.14 b.).
3. **combustion "hybride"** : ce régime est une combinaison des deux régimes précédents. Les fronts de flamme prémélangés brûlent en régime de combustion de groupe, proche de l'injection liquide, tandis que les flammes de diffusion ne parviennent pas à pénétrer le spray, du fait d'un environnement trop riche (Fig 2.14 c.). Le carburant non brûlé en régime prémélangé est consommé dans la flamme de diffusion générée entre le jet central et l'oxydant issu des nappes extérieures.

Pour caractériser ces différents régimes en fonction des paramètres de la configuration, les résultats sont organisés dans un diagramme de combustion (Fig. 2.15). Les axes du diagramme sont 1) le rapport de temps entre temps d'évaporation τ_v et temps chimique τ_f (évalué à la stœchiométrie pour la chimie réduite choisie) 2) le rapport de distance entre la distance moyenne inter-gouttes δ_s et l'épaisseur de flamme laminaire à la stoechiométrie δ_f, 3) la richesse liquide du jet central contenant les gouttes. Lorsque le rapport de temps est petit, les gouttes s'évaporent avant de brûler. Pour des temps d'évaporation plus longs, les quatres régimes deviennent observables, et leur apparition dépend de la richesse liquide d'entrée et du rapport de longueur (plan horizontal le plus bas sur la figure 2.15). Ici, la combustion de groupe correspond à la combustion de poche purement gazeuse de carburant. Lorsque le rapport τ_v/τ_f augmente, les gouttes subsistent plus longuement dans les zones réactives, entraînant une forte interaction avec les structures turbulentes. La topologie du mélange devient de plus en plus non-uniforme et génère l'ensemble des régimes précédemment décrits,

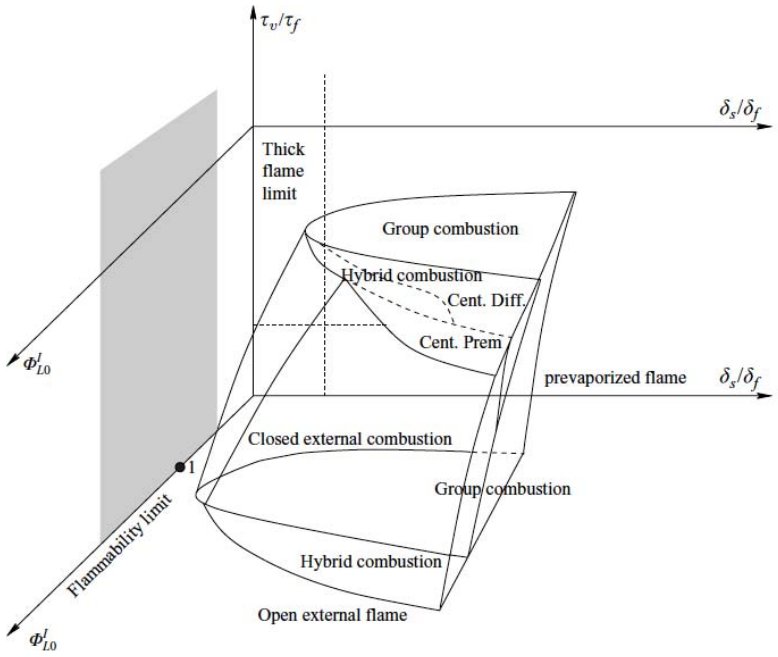

Figure 2.15 : *Diagramme tridimensionnel de régimes de combustion d'un spray dilué turbulent (extrait de [172]).*

avec une interaction forte entre spray, turbulence et réaction. Cette approche donne une première classification des régimes de combustion diphasique, mais ne rend pas compte du comportement des gouttes suffisamment grosses pour survivre au delà de la première zone réactive (rapport τ_v/τ_f » 1), du fait des limitations associées au cadre DNS-DPS.

Domingo *et al.* [60] étudient une configuration similaire en la comparant à un cas purement gazeux à richesse totale équivalente. La présence du spray complexifie la structure de flamme, mais la topologie "flammes prémélangées/non prémélangées" reste relativement identique dans ce cas particulier, où les gouttes sont très petites par rapport à l'échelle de Kolmogorov. Un filtrage de cette DNS est ensuite effectué afin d'obtenir un modèle de sous-maille de combustion diphasique applicable à la LES, en utilisant la donnée d'un indice de combustion calculé à partir des gradients résolus d'espèces (similaire à un indice de Takeno (Eq. 11.1)).

L'approche précédente est reprise quelques années plus tard par Baba *et al.* [9], en utilisant un modèle de combustion tabulé adapté à la combustion du spray (prise en compte les transferts de chaleur et de masse avec la phase liquide dans la construction et la lecture de la table). La flamme diphasique est également comparée à une flamme purement gazeuse similaire. Du fait de la ségrégation préférentielle générée par la turbulence, les gouttes ont tendance à se concentrer dans la périphérie extérieure des tourbillons, en s'évaporant de manière hétérogène. A l'inverse de la flamme gazeuse, purement non prémélangée, la réaction, dans le cas diphasique, ne se fait pas seulement à l'extérieur du spray, mais aussi dans la zone centrale, avec la présence des deux

modes de combustion très fortement imbriqués. De manière similaire et plus récente, Fujita *et al.* [75] et Kitano *et al.* [115] étendent l'approche précédente à une configuration 2D dont l'intensité turbulente est plus importante et les diamètres de gouttes injectées sont plus gros. Ils étudient notamment les effets de richesse, de diamètres de gouttes, de pression, ainsi que les effets radiatifs. Les résultats 2D présentent à nouveau une structure de flamme fortement modifiée par la présence de la phase liquide. La turbulence génère notamment des groupes de gouttes consommés en aval.

Les premières études 3D DNS-DPS réactives correspondent à des Turbulences Homogène Isotrope (THI) dans un domaine cubique tri-dimensionnel et chargé en gouttes. Réveillon *et al.* [171] étudient l'impact de la ségrégation préférentielle des gouttes dans une THI sur l'évolution d'une flamme naissante. La ségrégation préférentielle génère des groupes denses de gouttes qui produisent une forte concentration de carburant, ayant parfois pour conséquence de réduire fortement le taux d'évaporation, par saturation locale. Le front de flamme qui se propage dans la boîte est doublement perturbé, d'une part par la turbulence et d'autre part par le mélange fortement hétérogène de gouttes et de vapeur de carburant. Dans le cas de gouttes à petit nombre de Stokes initial, la combustion se fait plutôt de manière prémélangée. A l'inverse, dans le cas de gouttes à grand nombre de Stokes initial, la combustion est partiellement prémélangée. Neophytou *et al.* [154] étudient la phase d'allumage par claquage d'une bougie dans un nuage uniforme de gouttes placé dans une THI. Ils observent que l'énergie nécessaire pour réussir un allumage du spray est fortement liée à la quantité de gouttes dans le noyau d'allumage. La propagation du noyau se fait ensuite par différents modes, qui correspondent sensiblement aux modes II et III de propagation de Umemura *et al.* (Fig. 2.7). La présence d'une réaction très localisée autour des gouttes est également mise en évidence. Dans un cadre très similaire, l'auto-allumage d'un spray est étudié par Seo *et al.* [183, 184] puis Borghesi *et al.* [25]. Ils montrent que si le temps d'évaporation est faible devant le temps d'auto-allumage, la vapeur de carburant a le temps de bien se mélanger avec l'oxydant, ce qui correspond à une situation similaire au cas purement gazeux d'auto-allumage. En revanche, si le temps d'évaporation est du même ordre de grandeur que le temps d'auto-allumage, le mélange fortement hétérogène qui résulte de la ségrégation préférentielle des gouttes et de la polydispersion entraîne un auto-allumage du mélange localisé aux points ayant le mélange potentiellement le plus réactif. Dans un deuxième temps, la réaction s'étend par propagation dans le milieu aux zones moins réactives. La présence du spray peut donc avoir pour effet de rendre la phase d'allumage fortement hétérogène. L'influence du diamètre et de l'intensité de la turbulence sur les modes de propagation est aussi analysée.

Enfin, seules quelques études 3D DNS-DPS de spray réactif dans des configurations plus complexes sont aujourd'hui disponibles. Heye *et al.* [94] simulent un spray réactif dans un jet plan. Comme précédemment, l'influence du nombre de Stokes particulaire est mis en évidence : à nombre de Stokes faible et intermédiaire, on observe des zones de combustion prémélangées dans le coeur central du jet, du fait de l'évaporation et d'un mélange qui se fait avant la zone de réaction. Pour les grands nombres de Stokes, la combustion se fait essentiellement de manière non prémélangée. De même, Luo *et al.* [135] simulent un spray réactif dans un écoulement giratoire, très proche d'un sys-

tème industriel réaliste. La structure de flamme, reprise en Fig. 2.16 montre une forte imbrication des zones prémélangées et non prémélangées. Ils montrent que les flammes prémélangées contribuent pour plus de 70% au dégagement de chaleur total, bien que les régions qu'elles recouvrent correspondent à un volume plus faible que les zones de diffusion. De plus, les auteurs montrent que les zones prémélangées riches sont particulièrement importantes pour assurer la stabilisation de la flamme. Ils concluent qu'il est donc nécessaire d'améliorer la modélisation de la combustion diphasique pour décrire correctement les modes de combustion prémélangée et partiellement prémélangée qui sont présents dans ces situations.

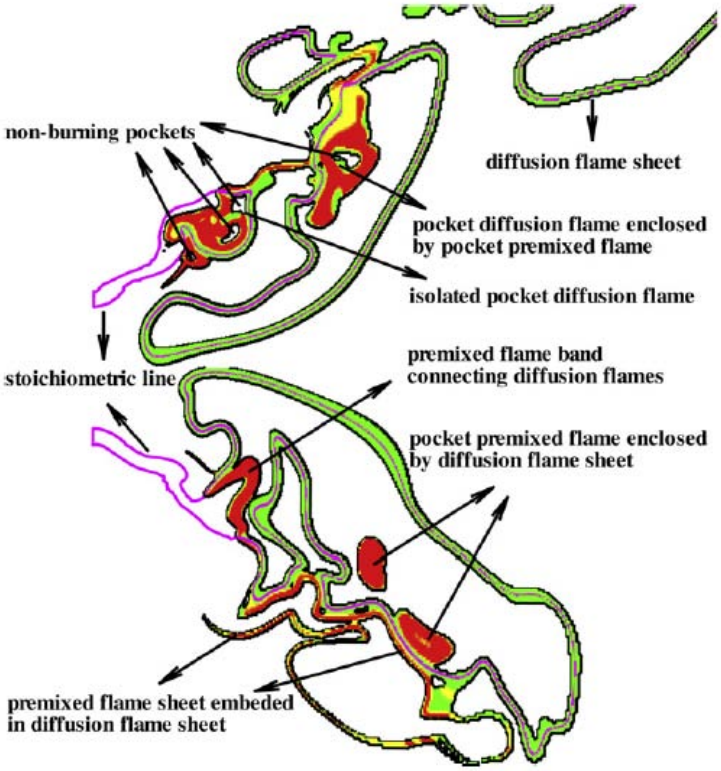

Figure 2.16 : *Structure instantanée d'une flamme diphasique turbulente (Violet : iso-ligne stoechiométrique ; Vert : flamme de diffusion ; Rouge : flamme de prémélange.) (extrait de [135]).*

2.4.2.3 Approche LES-DPS

Pour simuler un spray turbulent réactif dans une géométrie proche d'une configuration industrielle, l'approche LES, qui permet de résoudre les grandes échelles turbulentes d'un écoulement tout en modélisant les petites structures, est aujourd'hui largement utilisée et couplée à une résolution de la phase liquide, notamment DPS. Les coûts de calcul, plus raisonnables que l'approche DNS-DPS, permettent d'envisager la simulation de configurations complexes. La LES pour les

écoulements diphasiques turbulents réactifs est une approche encore au stade du développement académique. De nombreuses questions restent encore ouvertes et font l'objet d'une littérature contemporaine abondante.

A la complexité de l'approche LES pour les écoulements gazeux réactifs (modèles de sous-maille pour la turbulence et pour l'interaction turbulence/combustion) s'ajoutent deux difficultés liées à la présence de la phase liquide. D'une part, il faut modéliser l'influence réciproque des gouttes et de l'écoulement turbulent non résolu. D'autre part, il faut adapter les modèles de combustion pour prendre en compte la présence des gouttes, qui entraînent une forte hétérogénéité de mélange et de structure de flamme, à des échelles résolues et non résolues.

2.4.2.3.1 Modèles d'interaction avec la turbulence

La turbulence joue un rôle particulièrement important dans la dispersion du spray. Or, dans une simulation LES, seule les grandes structures sont résolues, les petites étant représentées par un modèle de sous-maille permettant de rendre compte de leur influence sur l'écoulement. Si la turbulence non résolue a une influence sur la dispersion du spray, il est nécessaire d'introduire également un modèle d'interaction turbulente du spray de sous-maille. Cependant, comme les gouttes ne sont pas toutes influencées de la même manière par une fluctuation de vitesse, il n'est pas toujours nécessaire d'appliquer un modèle supplémentaire. Cet aspect fait l'objet d'une étude approfondie de Fede *et al.* [71] pour la LES, qui prend aussi en compte les collisions entre gouttes. Une simulation DNS-DPS d'un nuage de gouttes turbulent, filtrée avec une taille typique de filtrage LES, montre que la dispersion des gouttes est faiblement dépendante de la vitesse turbulente de sous-maille. En effet, la dispersion des gouttes est essentiellement le fait des grandes structures turbulentes, résolues en LES. En revanche, en ce qui concerne l'interaction entre les gouttes et la turbulence locale, comme la ségrégation préférentielle (et le taux de collisions, non évoqué ici), un nombre de Stokes de sous-maille $\mathcal{S}t_\Delta$ est défini, permettant d'identifier trois classes de comportements distincts :

- $\mathcal{S}t_\Delta > 5$: peu d'influence de la turbulence non résolue, la concentration préférentielle n'est pas modifiée par le filtrage LES.
- $0,5 < \mathcal{S}t_\Delta < 5$: la turbulence de sous-maille a un effet non négligeable sur le spray, se traduisant par une dispersion aléatoire.
- $\mathcal{S}t_\Delta < 0,5$: les tourbillons de sous-mailles introduisent une forte concentration préférentielle. Le modèle doit alors pouvoir rendre compte des hétérogénéités de mélange liées à la ségrégation préférentielle des gouttes.

Pour $\mathcal{S}t_\Delta > 5$, il n'est pas nécessaire d'introduire de modèle supplémentaire. Pour $\mathcal{S}t_\Delta > 0,5$, la turbulence de sous-maille peut être réintroduite par le biais d'une approche lagrangienne stochastique. Par exemple, Pozorski *et al.* [165] propose de reconstruire la fluctuation de sous-maille le long de la trajectoire de la particule grâce à un modèle stochastique de Langevin. Bini *et al.* [19, 110, 109] introduisent dans le modèle de trainée une variable aléatoire markovienne qui prend

en compte la variété des comportements inertiels des gouttes. En revanche, pour $\mathcal{S}t_\Delta < 0,5$, les modèles stochastiques évoqué précédemment sont limitant et d'autres approches plus complexes sont nécessaires [185].

2.4.2.3.2 Modèles de combustion turbulente diphasique

Plusieurs modèles de combustion initialement dérivés dans le contexte purement gazeux ont été utilisés, avec ou sans modification, dans des LES de flammes turbulentes diphasiques, sans correction particulière dans un premier temps. Les principaux travaux avec formalisme LES-DPS, prenant en compte la phase liquide dans le modèle de combustion turbulente, sont décrits dans la suite.

2.4.2.3.3 Méthode statistique PDF

Le filtrage de l'écoulement réalisé dans l'approche LES introduit une perte d'information statistique sur les fluctuations locales de vitesse, de composition et de température. En particulier dans un cas réactif, une information précise de la composition et de la température locale est nécessaire pour bien prédire le taux de réaction local, du fait de la forte non-linéarité des cinétiques chimiques d'oxydation. Cependant, cette information statistique peut être réintroduite en définissant une fonction densité de probabilité (PDF) filtrée $\widehat{\mathcal{P}}(\Phi)$ sur l'espace des compositions et des températures $\Phi = (Y_1, Y_2, ..., Y_N, T)$ avec N le nombre d'espèces [164]. Si cette PDF est connue, le taux de réaction local filtré est estimé précisément par :

$$\widetilde{\dot{\omega}} = \int \dot{\omega}(\Phi)\widehat{\mathcal{P}}(\Phi)d\Phi \tag{2.4}$$

où $\dot{\omega}(\Phi)$ est le taux de réaction obtenu à partir de la cinétique chimique choisie. Dans le cas purement gazeux, cette PDF vérifie une équation de transport sous la forme :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\,\widehat{\mathcal{P}}(\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}[\overline{\rho}\widehat{u_j}\widehat{\mathcal{P}}(\Phi)] + \sum_{k=1}^{N}\frac{\partial}{\partial \Phi_k}\left[\frac{1}{\rho}\dot{\omega}(\Phi)\overline{\rho}\widehat{\mathcal{P}}(\Phi)\right] = -\frac{\partial}{\partial x_j}[\langle u_j''|\Phi\rangle\overline{\rho}\widehat{\mathcal{P}}(\Phi)] + \sum_{k=1}^{N}\frac{\partial}{\partial \Phi_k}\left(\langle\frac{1}{\rho}\frac{\partial J_{i,k}}{\partial x_i}|\Phi\rangle\overline{\rho}\widehat{\mathcal{P}}(\Phi)\right) \tag{2.5}$$

avec $J_{i,k}$ le flux de diffusion moléculaire. Alors que les trois termes de gauche sont fermés, les termes de droite nécessite des modèles de fermeture particulièrement complexes à obtenir. Le premier traduit la variation de la PDF par le transport turbulent et le deuxième exprime le mélange moléculaire dans l'espace des compositions.

Cette équation doit être résolue en parallèle des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces. Or, le coût numérique lié à la résolution de cette équation est prohibitif au vu du nombre de dimensions de Φ. Afin de résoudre cette équation à un cout raisonnable, deux approches sont possibles :

- approche des PDF transportées : on utilise une méthode Monte Carlo pour obtenir une résolution approchée de la PDF, dont l'espace des phases a généralement été préalablement réduit.
- approche des PDF présumées : après avoir réduit l'espace des phases en tirant parti de la structure de flamme, on présume la forme de la PDF associée à ce nombre limité de paramètres de Φ, et on ne transporte qu'un nombre limité de moment décrivant la PDF (typiquement les deux premiers moments : moyenne et variance). Cette méthode est beaucoup moins couteuse que la première.

L'application de ces approches PDF au cas turbulent réactif avec présence d'un spray nécessite quelques adaptations, car l'évaporation modifie notamment la composition et la température locale. L'influence du spray se traduit par un terme source supplémentaire dans l'équation de transport de la PDF, qui est fermé au même titre que le terme source de réaction, par le modèle d'évaporation des gouttes.

Heye *et al.* [93, 94, 95] propose de résoudre l'équation de transport en utilisant un approche stochastique lagrangienne de Monte-Carlo[164] : l'espace des phases est décrit par une ensemble de particules transportant une valeur particulière de Φ et entrainée par l'écoulement. L'évolution interne de ces particules suit un système d'équations stochastiques dont l'ensemble est équivalent à l'équation de transport de la PDF. Cette méthode est appliquée à la simulation d'une configuration académique d'un spray réactif d'éthanol à l'aide d'une chimie réduite [94] puis d'un couplage avec une chimie détaillée tabulée [95]. Un très bon accord avec les résultats expérimentaux est obtenu, mais au prix d'un coût de calcul important.

Ge *et al.* [77, 78] simulent un spray réactif d'éthanol en utilisant un transport par méthode lagrangienne Monte-Carlo, de la PDF réduite à deux variables (fraction de mélange et enthalpie), couplée à une chimie tabulée prenant en compte la phase liquide [98]. La comparaison avec expérience est satisfaisante si l'ordre de résolution de la PDF est suffisamment élevé.

Le groupe de recherche de Jones *et al.* [211, 109, 108] propose une approche alternative pour calculer l'équation de transport de la PDF, en utilisant un ensemble de champ eulérien stochastique, représentant la PDF de manière approchée. Une comparaison avec l'expérience [109] permet d'évaluer le nombre de champs eulériens qui représentent convenablement la PDF (9 dans leur cas). Une chimie réduite à quelques étapes est utilisée, afin de réduire l'espace Φ (4 pour [109], 14 pour [108]). Leur résultats sont également en bon accord avec l'expérience en termes d'écoulement, de dispersion du spray et de température.

Dans l'approche des PDF présumées, Hollmann *et al.* [98] propose de réduire l'espace des phases à la fraction de mélange et au taux de dissipation scalaire (méthode classique pour les flammes non prémélangées [164]), auxquels ils ajoutent la taille initiale et la vitesse initiale des gouttes, ainsi que la richesse. Ces 5 variables leur permettent de récupérer le taux de réaction local à partir d'une table de très grande taille construite dans un cas avec spray et chimie détaillée. Les auteurs présument ensuite la forme des PDF de chacune des 5 variables, supposées indépendantes, avec des

fonctions simples (fonction β ou distribution log-normale), permettant de s'affranchir de l'équation de transport. Leur approche modifie fortement la structure de la flamme obtenue, par rapport à l'application d'une approche PDF présumée non corrigée par la phase liquide [87]. En revanche, Ge *et al.* [79] met en évidence deux limites de cette approche. D'une part, l'utilisation de fonctions β pour présumer la forme des PDF n'est pas adaptée au contexte diphasique. D'autre part, les variables de l'espace des phases ne sont pas indépendantes et une PDF jointe devrait être utilisée.

De S. *et al.* [55, 54] simule un spray turbulent réactif et non réactif par approche PDF présumée, en réduisant l'espace des phases à une fraction de mélange définie par Bilger pour les milieux diphasiques [18] et une variable de progrès. Une prise en compte par le modèle d'évaporation, de la fluctuation de la composition et de la température gazeuse est également appliquée. L'accord de cette méthode avec les résultats expérimentaux est très bon, en termes de comportement du spray et de température gazeuse.

2.4.2.3.4 Méthode statistique CMC

Une autre méthode de résolution de la combustion turbulente, intermédiaire aux deux premières en terme de complexité, consiste à filtrer les équations de transport d'espèce conditionnellement à une variable conservative, comme la fraction de mélange par exemple, en tirant parti de la corrélation importante entre fraction massique d'espèce et fraction de mélange. Cette approche, appelée " CMC" pour "Conditionnal Moment Closure", est proposée initialement par Klimenko et Bilger [116] puis adaptée aux cas avec spray par Mortensen et Bilger [148] et étendu au formalisme LES par Navarro-Martinez *et al.* [150]. Borghesi *et al.* [25] compare une simulation CMC de THI cubique à une DNS chargée d'un nuage de gouttes, qui permet d'étudier l'auto-allumage du spray. L'approche CMC capture bien les tendances physiques observées dans la DNS et le délai d'auto-allumage du nuage. Les auteurs pointent néanmoins le fait que la précision de modèles de fermetures CMC est fondamentale pour que la méthode soit prédictive. Tyliszczak *et al.* [204] étudie les comportements d'extinction d'une flamme spray stabilisée par giration et compare les résultats d'une approche CMC avec des données expérimentales. La limite d'extinction expérimentale est notamment bien reproduite par l'approche CMC. Les auteurs pointent eux aussi la sensibilité du résultat aux modèles de fermetures.

Ces modèles statistiques de combustion turbulente sont relativement couteux à mettre en oeuvre, mais permettent d'obtenir de bons résultats dans l'ensemble et proposent notamment un cadre propice à l'amélioration des modèles et la prise en compte de nouvelles complexités physiques. De nombreuses questions restent cependant ouvertes sur ces méthodes, qui demandent encore un travail de recherche pour pouvoir être applicables dans un contexte industriel.

2.4.2.3.5 Méthode de flamme épaissie artificiellement

Ce modèle géométrique de combustion turbulente permet de résoudre explicitement la structure de flamme prémélangée gazeuse sur un maillage trop grossier pour être résolu en DNS [162]. La flamme est épaissie fictivement en modifiant d'un facteur d'épaississement F les diffusivités d'espèces et de température, tout en divisant par le même facteur les termes réactionnels (Sect. 3.4.3). L'équation de transport de la fraction massique de carburant s'écrit par exemple :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial F t} + \frac{\partial \rho u Y_F}{\partial F x} = \frac{\partial}{\partial F x}\left[\rho \mathcal{D} F \frac{\partial \rho u Y_F}{\partial F x}\right] + \frac{\dot{\omega}_F}{F} \tag{2.6}$$

Ces corrections permettent notamment d'obtenir la bonne vitesse de flamme. La nouvelle épaisseur de flamme $F\ \delta_{f,0}$, où $\delta_{f,0}$ est l'épaisseur réelle de la flamme, induit une réponse différente de la flamme épaissie à la turbulence. Pour limiter cet effet, un facteur d'efficacité, E, est introduit devant le taux de consommation $\dot{\omega}_F/F$ de sorte à corriger la sous-estimation du plissement de la flamme et préserver la vitesse de flamme turbulente[162].

Lorsqu'une goutte traverse une flamme "épaissie", les équations d'évolution de cette goutte doivent être corrigées pour maintenir les mêmes caractéristiques physiques par rapport à la référence non épaissie. Une première tentative de correction, pour une modélisation eulérienne de la phase liquide, a été proposée par Boileau *et al.* [23], puis étendue pour la DPS par Senoner *et al.* [182]. Dans la flamme épaissie, le taux d'évaporation est divisé par F afin de prendre en compte l'allongement des délais dans la zone épaissie. L'application et la validation de cette adaptation dans une configuration complexe n'a pas encore fait l'objet d'une étude approfondie. La correction [23, 182] est étendue et validée en LES-DPS en Sect. 8.1.

2.4.2.3.6 Modélisation de la combustion hétérogène

Enfin, on peut citer une dernier type de modélisation de l'interaction spray/combustion, adaptée au traitement de la combustion hétérogène du spray. La présence de phénomènes réactifs très locaux autour des gouttes (cf. Chap 8) peuvent être pris en compte dans un modèle macroscopique appliqué à la goutte. Cette approche permet notamment de s'affranchir de l'interaction entre le modèle de combustion turbulente gazeuse et le spray, mais ne concerne que la modélisation des régimes de combustion hétérogènes (Fig. 2.2). Ces modèles peuvent prendre en compte les différents états possibles d'une goutte isolée, en y associant un modèle d'évolution de goutte adaptée au mode de combustion de la goutte. Huang & Chiu [45, 100] proposent un modèle multi-régimes qui s'appuie sur une base de données établie en DNS d'une goutte isolée dans un écoulement laminaire permettant de construire des critères de transition d'un état à un autre, basés sur un nombre de Damkhöler, et d'obtenir le taux d'évaporation ou de combustion de la goutte en fonction des conditions environnantes. Trois états sont possibles pour une goutte : évaporation pure, flamme enveloppe, et flamme sillage. Chaque goutte transporte l'état dans lequel elle se trouve, et un petit algorithme facilement intégrable à un code CFD permet de définir l'état de chaque goutte à chaque

itération en fonction des paramètre environnant et de l'état précédent[45]. Une comparaison *a posteriori* entre ce modèle multi-états et les modèles classiques d'évaporation, est proposée dans [100] en transportant un spray dans une couche de mélange réactive purement gazeuse. L'interaction spray/combustion n'est pas complète, puisque le spray n'interagit pas avec le gaz dans cette comparaison *a posteriori*. En revanche, cette étude montre l'intérêt de transférer, dans certain cas, la résolution de la combustion dans le modèle macroscopique de transfert de masse et de chaleur de la goutte. Ces travaux n'ont pas été étendus à la simulation couplée d'une configuration complexe. De plus, la plage de validité des critères de transition et des corrélations permettant d'obtenir le taux d'évaporation ou de combustion de la goutte, est limitée par l'étendu de la base de donnée DNS, qui ne couvre malheureusement pas l'ensemble de la plage de fonctionnement d'une chambre de combustion. Plus récemment, Wang *et al.* [214] proposent une approche plus simple mais similaire, en définissant un critère d'allumage d'une goutte en fonction des conditions thermodynamiques locales. Leur modèle est appliqué dans une LES-DPS d'une configuration complexe et permet de mieux prédire les résultats expérimentaux du champ de température en aval d'un spray de méthanol immergé dans un jet turbulent réactif, par rapport à une approche de modélisation classique, ne considérant qu'un modèle d'évaporation. En revanche, la simplicité de ce modèle ne permet pas de rendre compte précisément de certains phénomènes tels que l'extinction de goutte. Enfin, De *et al.* [54] intègrent dans leur simulation LES-DPS la possibilité du mode enveloppe pour les gouttes. En plus d'un critère simple d'allumage de gouttes (condition sur la fraction de mélange locale), les auteurs intègrent un critère simplifié d'extinction, proposé par Bilger [18]. Ces méthodes ont l'avantage de rendre compte, dans la mesure du possible, d'un phénomène sous-résolu par la LES, mais dont l'importance ne peut pas être négligée, notamment en présence de gouttes significativement grosses.

2.5 Objectifs et plan de la thèse

2.5.1 Développement du code AVBP

Depuis plus de 20 ans, le CERFACS développe, en collaboration avec l'IFP-Energies Nouvelles, le code de calcul AVBP qui permet de résoudre les équations de Navier-Stokes compressibles turbulentes sur des maillages non-structurés hybrides, en se basant principalement sur le formalisme LES, pour des applications massivement parallèles. Ce code CFD a déjà fait l'objet de très nombreuses applications et publications en combustion turbulente [81, 181], et démontre une très bonne scalabilité jusqu'à un très grand nombre de processeurs[196]. Il fait également l'objet d'un développement continu afin d'augmenter d'une part le niveau de fidélité des simulations numériques en s'appuyant sur les nombreux travaux de recherche du CERFACS, et d'autre part, le niveau TRL global du code, permettant d'introduire l'utilisation d'AVBP dans un contexte industriel. Le développement du solveur lagrangien, qui permet d'effectuer dans AVBP une résolution lagrangienne de la phase liquide dispersée, est récent (début en 2006) et a fait l'objet de 5 thèses. Garcia [76] pose les bases du solveur lagrangien, permettant de résoudre la dynamique du spray. Jaegle [103] introduit la prise en compte de l'évaporation du spray et réalise les premières simulations LES-DPS réactives avec AVBP. Senoner [182] travaille notamment sur l'injection du spray et sur un modèle d'atomisation secondaire. Sierra [186] introduit une amélioration du modèle d'évaporation permettant de mieux prédire les résultats expérimentaux d'évaporation de goutte. Chaussonnet [37] introduit un modèle d'interaction de film à la paroi et d'atomisation en bord de lèvre. Le solveur lagrangien a notamment été validé sur un certain nombre de configurations académiques simples (HIT, bluff body) et complexes (chambre "Mercato" [104] notamment) et appliqué à des chambres de combustion aéronautiques [103, 37, 88]. Les applications issues de ces thèses illustrent notamment le potentiel de la méthode LES-DPS pour résoudre les écoulements diphasiques réactifs. Il a également été mis en évidence la nécessité de compléter la validation du code sur une configuration académique de complexité intermédiaire.

2.5.2 Objectifs de la thèse

Le travail de thèse présenté ici est financé par l'industriel français Turbomeca, leader mondial sur le marché des moteurs d'hélicoptères. Les objectifs principaux de cette thèse sont les suivants :

1. Poursuivre les développements et l'optimisation du solveur lagrangien d'AVBP, qui permettent notamment d'envisager son déploiement en contexte industriel et une élévation de son niveau TRL.
2. Participer à la compréhension des mécanismes prépondérants dans la combustion turbulente d'un spray, en s'appuyant sur la LES-DPS, et proposer des nouvelles approches de modélisation adaptées à la LES, qui permettent d'améliorer la fidélité des simulations de spray réactifs en géométrie complexe.

3. Effectuer une validation du solveur lagrangien avec une configuration académique discriminante, pour établir la validité des résultats obtenus avec AVBP et orienter les développements futurs.

2.5.3 Plan du manuscrit

Le manuscrit est organisé de la façon suivante :

- Dans la partie II, l'ensemble des équations et des modèles utilisés dans cette thèse sont détaillés. Le chapitre 3 s'intéresse aux modèles de résolution de la phase gazeuse. Le chapitre 4 présente les équations lagrangiennes du spray et les méthodes de couplage entre phases liquide et gazeuse, ainsi que le contenu des modèles macroscopiques traitant l'évolution d'une goutte isolée dans le spray dilué.
- La partie III présente les principaux développements du code effectués au cours de la thèse. Le chapitre 5 introduit un nouvel algorithme de traitement du mouvement des particules lagrangiennes dans le maillage, qui permet notamment d'augmenter la robustesse du solveur en configuration complexe. Un nouvelle fonctionnalité d'injection, qui permet d'introduire une population quelconque en taille de goutte dans un calcul, est également proposée dans ce chapitre. Le chapitre 7 propose une optimisation de la répartition des particules lagrangiennes permettant d'améliorer la convergence statistique de la DPS.
- La partie IV présente un travail de modélisation de la combustion diphasique dans le contexte LES, qui traite notamment l'interaction du spray avec le modèle de combustion turbulent et prends en compte la combustion de gouttes isolées en LES (Chap. 8). Cette modélisation est ensuite validée dans des configurations de complexité croissante (Chap. 9).
- La partie V présente une application dans un cas académique (Chap. 10), qui permet d'effectuer dans un premier temps une validation par rapport à une expérience proche du système industriel de référence (Chap. 11), et dans un deuxième temps, d'appliquer et de comparer le nouveau modèle de combustion diphasique avec le modèle d'évaporation classique, dans un cas complexe (Chap. 12).

Deuxième partie

Equations et modèles pour la combustion turbulente d'un spray

Chapitre 3

Simulation de l'écoulement gazeux turbulent réactif - Equations et modèles

Sommaire

3.1 Principales notions en turbulence et en combustion 65
3.1.1 Généralités sur la turbulence 65
3.1.2 Généralités sur la combustion 67
3.2 Cinétique chimique 69
3.3 Equations conservatives de la phase gazeuse 70
3.3.1 Système d'équations pour un écoulement gazeux réactifs 70
3.3.2 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes 71
3.4 Système d'équations LES 72
3.4.1 Tenseur des contraintes de Reynolds non-résolu - Modèle WALE 73
3.4.2 Transport d'espèces et chaleur non résolus 74
3.4.3 Taux de réaction filtrés - modèle de flamme épaissie TFLES 74

Ce chapitre présente brièvement les équations qui décrivent un écoulement turbulent gazeux, s'appuyant sur des approches classiquement utilisées dans la littérature. Dans un premier temps, les notions essentielles en combustion et en turbulence sont brièvement abordées. Dans un deuxième temps, les équations de la mécanique des fluides et la procédure classique de filtrage LES sont décrites. Enfin, les modèles de fermeture classique utilisés dans ce travail sont brièvement décrits.

3.1 Principales notions en turbulence et en combustion

3.1.1 Généralités sur la turbulence

On dit d'un écoulement qu'il est turbulent lorsque sa vitesse locale présente une fluctuation significative et irrégulière, en temps et en espace. Au contraire, on dit d'un écoulement qu'il est laminaire lorsque les volumes élémentaires composant le fluide ont des trajectoires parallèles les unes

avec les autres. Lorsque l'on augmente la vitesse d'un écoulement laminaire dans un conduit par exemple, il est possible d'observer une transition de cet écoulement laminaire, vers un écoulement turbulent. Cette transition vers la turbulence peut être caractérisée par la définition du nombre de Reynolds, qui représente un rapport entre les forces inertielles et les forces visqueuses :

$$\mathcal{R}_e = \frac{u\, l}{\nu} \tag{3.1}$$

où u et l correspondent respectivement à une vitesse et à une longueur caractéristiques de l'écoulement considéré [1] et ν la viscosité cinématique. Le nombre de Reynolds peut être interprété comme une capacité de l'écoulement à amortir le développement d'instabilité hydrodynamique. Il permet donc d'étudier la transition vers la turbulence. Un écoulement à très faible nombre des Reynolds, très visqueux [2] ne présentera aucune turbulence. A l'inverse, il existe une valeur du nombre de Reynolds au delà de laquelle se développe la turbulence.

La turbulence est un phénomène qui caractérise d'une part une fluctuation des propriétés d'un écoulement au travers de structures tourbillonaires, et d'autre part une dissipation de l'énergie cinétique en chaleur. Les processus complexes d'interaction entre ces tourbillons sont intrinsèquement tri-dimensionnels. Richardson [174] puis Kolmogorov [117] observent une décroissance caractéristique de la taille des structures tourbillonnaires au cours du temps, et proposent un mécanisme, nommé cascade d'énergie turbulente, schématisé en Fig. 3.1, dont le principe est décrit dans la suite.

Les gros tourbillons de l'écoulement turbulent ont une grande taille caractéristique, généralement proche de la taille caractéristique de l'écoulement (largeur du conduit, taille des éléments géométriques immergés, etc). Leur apparition est généralement liée à la présence d'objets ou de parois dans l'écoulement. Le nombre de Reynolds associé à ces tourbillons [3] est grand. Ces tourbillons sont donc peu soumis aux effets visqueux et ont tendance à devenir instables. De ce fait, ils se disloquent progressivement en tourbillons de taille inférieure. Les tourbillons de plus petite taille deviennent eux aussi instables, et sont également étirés et déformés par les forces de cisaillement créés par les gros tourbillons. La dislocation des tourbillons se répète en cascade jusqu'à une échelle spatiale pour laquelle les effets visqueux deviennent prédominants, ce qui entraine une stabilisation de la structure tourbillonnaire de l'écoulement. A cette petite échelle, la viscosité dissipe progressivement l'énergie cinétique contenue dans les petits tourbillons en chaleur.

La structure turbulente la plus grande de l'écoulement, notée l_t, est appelée "échelle intégrale" de l'écoulement. Elle est alimentée par les grandes structures géométrique qui forme l'écoulement macroscopique. A l'opposé, la plus petite structure turbulente, notée η_K correspond à la structure la plus dissipative en dessous de laquelle aucune structure tourbillonaire n'existe. Elle est appelée "échelle de Kolmogorov" et correspond à $\mathcal{R}_e \sim 1$. Le spectre de densité énergétique $E(K)$ obtenu

1. Par exemple, dans le cas classique d'un cylindre dans un écoulement, u correspond à la vitesse de l'écoulement par rapport au cylindre, et l correspond à la section du cylindre.
2. le miel par exemple
3. estimé par l'équation 3.1 pour un tourbillon avec l leur diamètre et u leur vitesse de rotation.

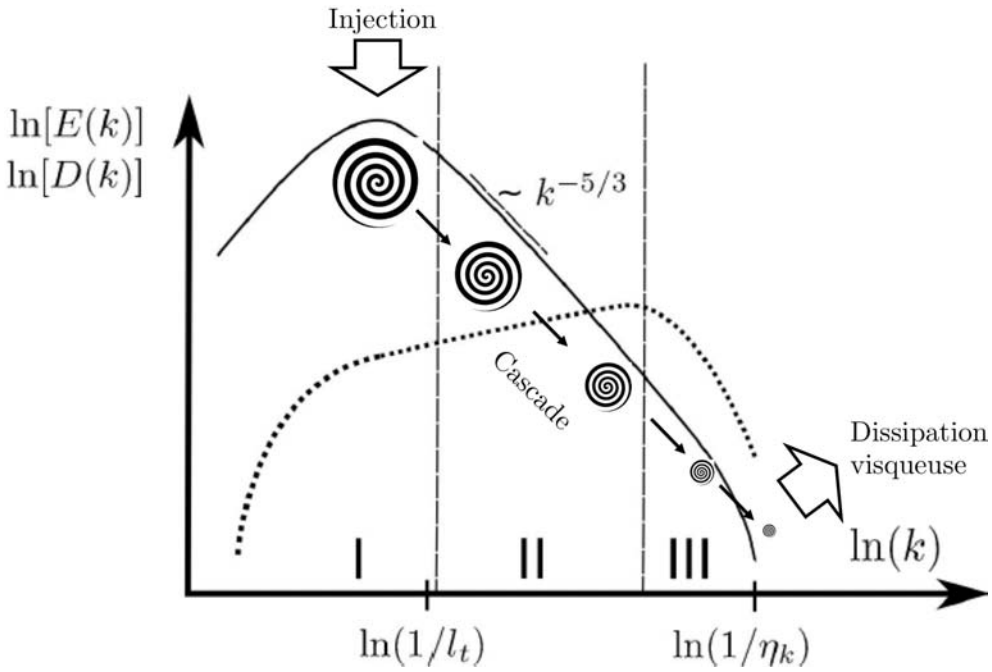

Figure 3.1 : *Schéma du spectre d'énergie $E(K)$ (ligne continue) et de dissipation $D(K)$ (ligne pointillée). On distingue la zone I, contenant la majeure partie de l'énergie, la zone inertielle II, et la zone de dissipation III.*

à partir des tourbillons contenus dans un écoulement turbulent est schématisé dans un diagramme d'abscisse K, appelé "nombre d'onde", qui est proportionnel à **l'inverse** du diamètre caractéristique d'un tourbillon [4] (Fig. 3.1). Pour une turbulence isotrope et stationnaire, on observe une zone caractéristique de pente $K \sim -5/3$, appelée zone inertielle. Cette pente de dissipation est caractéristique de la turbulence et peut être observée dans de très nombreuses situations, de géométries variées. La cascade de Kolmogorov correspond au transfert d'énergie des petits K aux grands K jusqu'à dissipation complète de l'énergie cinétique initialement contenue dans les gros tourbillons.

3.1.2 Généralités sur la combustion

3.1.2.1 Mélange

L'étude de la combustion implique l'étude d'un fluide multi-espèces. L'espèce k au sein d'un mélange peut-être caractérisée par les quantités suivantes :

- Sa fraction de mélange Y_k définie par $Y_k = m_k/m$, où m est la masse totale et m_j la masse de l'espèce k.
- Sa masse molaire W_k, qui permet de définir sa fraction molaire $X_k = Y_k W/W_k$ et sa concentration molaire $[X_k] = \rho X_k/W$ avec W la masse molaire moyenne du mélange.

4. Un petit K correspond à un gros tourbillon, et inversement.

- Sa masse volumique partielle $\rho_k = \rho Y_k$.
- Sa capacité calorifique à pression constante C_P^k.
- Son enthalpie sensible $h_{s,k} = \int_{T_0}^{T} C_P^k dT$ (avec T la température et T_0 une température de référence) et son enthalpie standard de formation $\Delta h_{f,k}^0$, qui forment son enthalpie $h_k = h_{s,k} + \Delta h_{f,k}^0$

Pour un mélange de N espèces, les quantités définies précédemment sont liées par la loi des gaz parfaits :

$$P = \sum_{k=1}^{N} P_k = \sum_{k=1}^{N} \rho_k \mathfrak{R} T / W_k \tag{3.2}$$

où T est la température du mélange et $\mathfrak{R} = 8,314\ J/mol/K$ est la constante des gaz parfaits. La masse volumique du mélange étant définie par $\rho = \sum_{k=1}^{N} \rho_k$, on obtient l'équation d'état du mélange :

$$P = \frac{\rho}{W} \mathfrak{R} T \tag{3.3}$$

avec

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=Y_k}^{N} \frac{1}{W_k} \tag{3.4}$$

3.1.2.2 Transport

Les coefficients de diffusivité thermique et moléculaire sont respectivement notés $\mathcal{D}_{th}$ et $\mathcal{D}_k$. La définition de $\mathcal{D}_{th}$ utilise le coefficient de conduction thermique λ et s'écrit :

$$\mathcal{D}_{th} = \frac{\lambda}{\rho C_P} \tag{3.5}$$

où C_P est la capacité calorifique du mélange. $\mathcal{D}_k$ tient compte des coefficients de diffusivité moléculaire binaire $\mathcal{D}_{j,k}$ entre l'espèce k et chacune des autres espèces j, d'après la théorie cinétique des gaz [35] :

$$\mathcal{D}_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} (X_j \mathcal{D}_{j,k})} \tag{3.6}$$

Ces coefficients de transport permettent de définir 3 nombres adimensionnés qui seront utilisés dans la suite de l'étude : le nombre de Lewis $\mathcal{L}e_k$ de l'espèce k, qui compare le coefficient de transport de chaleur au coefficient de transport moléculaire de l'espèce k, le nombre de Prandtl $\mathcal{P}r$, qui compare la diffusivité de quantité de mouvement à la diffusivité thermique et le nombre de Schmidt $\mathcal{S}c_k$ de l'espèce k, qui compare la diffusivité de quantité de mouvement à la diffusivité moléculaire.

$$\mathcal{L}e_k = \frac{\lambda}{\rho C_P \mathcal{D}_k} = \frac{\mathcal{D}_{th}}{\mathcal{D}_k} \tag{3.7}$$

$$\mathcal{P}r = \frac{\mu}{\lambda / (\rho C_P)} = \frac{\nu C_p}{\lambda} \tag{3.8}$$

$$\mathcal{S}c_k = \frac{\nu}{\mathcal{D}_k} = \mathcal{P}r\mathcal{L}e_k \tag{3.9}$$

avec $\mu = \rho\nu$ la viscosité dynamique, qui peut être obtenue par la loi de Sutherland ou une loi puissance [199] :

$$\text{Loi de Sutherland :} \mu = \mu_{0,R}\frac{T^{3/2}}{T+c_2}\frac{T_R+c_2}{T_R^{3/2}} \tag{3.10}$$

$$\text{Loi puissance :} \mu = \mu_{0,R}\left(\frac{T}{T_R}\right)^{c_2} \tag{3.11}$$

où $\mu_{0,R}$ et T_R sont des paramètres dépendant du mélange.

3.2 Cinétique chimique

Un mécanisme cinétique est un système de M réactions impliquant N espèces définies pour$j = 1, M$ par :

$$\sum_{k=1}^{N} \nu'_{k,j}\mathcal{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N} \nu''_{k,j}\mathcal{M}_k \tag{3.12}$$

où $\mathcal{M}_k$ représente l'espèce k, $\nu'_{k,j}$ et $\nu''_{k,j}$ sont les coefficients stoechiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction j.

Le taux de réaction massique $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est la somme des taux de réaction des M réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{M} \dot{\omega}_{k,j} = W_k \sum_{j=1}^{M} \nu_{k,j}\mathcal{Q}_j \tag{3.13}$$

où $\nu_{k,j} = \nu''_{k,j} - \nu'_{k,j}$, et $\mathcal{Q}_j$ le taux d'avancement de la j-ème réaction, qui s'écrit :

$$\mathcal{Q}_j = K_{*,j}\prod_{k=1}^{N}[X_k]^{\nu'_{k,j}} - K_{r,j}\prod_{k=1}^{N}[X_k]^{\nu''_{k,j}} \tag{3.14}$$

où $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont respectivement les coefficients de vitesse de la réaction j directe et de la réaction j inverse. La loi empirique d'Arrhénius donne une expression simplifiée de ces vitesses :

$$K_{f,j} = A_{f,j}T^{\beta_j}exp\left(\frac{E_j}{\mathfrak{R}T}\right) \tag{3.15}$$

où $A_{f,j}$ et E_j sont respectivement le facteur d'Arrhénius et l'énergie d'activation de la réaction directe j. L'équilibre de la réaction, appelée loi d'action de masse, impose :

$$\frac{K_{f,j}}{K_{r,j}} = K_C \tag{3.16}$$

où K_C est la constante d'équilibre de la réaction.

3.3 Equations conservatives de la phase gazeuse

3.3.1 Système d'équations pour un écoulement gazeux réactifs

L'écoulement est décrit par les équation de conservation pour la masse, la quantité de mouvement (équation de Navier-Stokes), les espèces et l'énergie totale.

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{3.17}$$

où un index répété i implique une somme sur cet index (règle de sommation d'Einstein).

Conservation de la quantité de mouvement dans la direction j

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} \tag{3.18}$$

où le tenseur des contraintes σ_{ij} est défini comme la somme du tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} et du tenseur des contraintes de pression $P\delta_{ij}$:

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + \tau_{ij} = -P\delta_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij} + \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{3.19}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Conservation des espèces

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho Y_k (u_i + V_{k,i})\right) = \dot{\omega}_k \tag{3.20}$$

où $V_{k,i}$ est la composante i de la vitesse de diffusion de l'espèce k définie comme :

$$V_{k,i} = -\mathcal{D}_k \frac{\nabla X_k}{X_k} + V_i^c \tag{3.21}$$

avec une vitesse de correction permettant d'assurer la conservation de la masse :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{3.22}$$

Conservation de l'énergie

Il existe plusieurs formulations permettant de définir la conservation de l'énergie. On choisira l'expression de l'énergie totale non chimique E, qui correspond à

$$E = e_t - \sum_{k=1}^{N} \Delta h^0_{f,k} Y_k \tag{3.23}$$

où e_t est l'énergie totale. E suit l'équation d'évolution suivante :

$$\frac{\rho\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i E\right) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(-\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho\sum_{k=1}^{N} h_{s,k}Y_k V_{k,i}\right) + \frac{\partial \sigma_{ij}u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T \tag{3.24}$$

où le taux de dégagement de chaleur s'écrit :

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^{N}\Delta h^0_{f,k}\dot{\omega}_k \tag{3.25}$$

3.3.2 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes

On a vu précédemment qu'une approche de simulation numérique directe (DNS) du système d'équations précédent n'était pas envisageable dans un contexte industriel. Etant donnée la nature stochastique de la turbulence, il est possible de simplifier l'approche en effectuant une moyenne statistique de l'écoulement turbulent. Si l'on suppose qu'il existe une telle moyenne statistique, il est possible de décomposer la vitesse en la somme d'une valeur moyenne et d'une fluctuation autour de cette valeur [5] :

$$u_i = < u_i > + u_i'' \tag{3.26}$$

Ici, $< . >$ désigne une moyenne d'ensemble. L'opérateur de moyenne $< . >$ correspond généralement à une moyenne arithmétique de la vitesse, faite en tout point de l'espace et du temps sur un grand nombre de réalisations N de la même expérience :

$$< u_i > (x_i, t) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} u_i(x_i, t) \tag{3.27}$$

En appliquant cette décomposition au système d'équations précédent, il est possible d'obtenir un système d'équations d'évolution moyenne de l'écoulement réactif turbulent, appelé RANS pour "Reynolds Averaged Navier-Stokes", qui fait apparaître l'influence de la turbulence sur le champ moyen par le biais de termes d'ordre élevés. Ces termes doivent nécessairement être fermé avec des modèles de turbulence, qui doivent être capables de rendre compte de l'ensemble des échelles turbulentes présentes dans l'écoulement, comme illustré en Fig. 3.2. Une fermeture classique consiste à modéliser ces termes par une viscosité additionnelle, appelée viscosité turbulente, qui permet de rendre compte de la dissipation turbulente. Malheureusement, les modèles de fermeture RANS manquent généralement d'universalité, car les grandes structures turbulentes sont très dépendantes de la configuration particulière de l'écoulement. Cependant, les faibles coûts de calcul de l'approche RANS expliquent son utilisation quotidienne en bureau d'étude.

Une approche intermédiaire au RANS et à la DNS, dénommée simulation aux grandes échelles ou 'Large Eddy Simulation' (LES) consiste à filtrer les équations de Navier-Stokes afin de retirer les mouvements des petites structures turbulentes, ayant un comportement supposé universel, tout en résolvant explicitement les échelles les plus grandes dépendant du cas étudié, comme illustré en

5. Cette décomposition a été introduite en premier lieu par Osborne Reynolds [173].

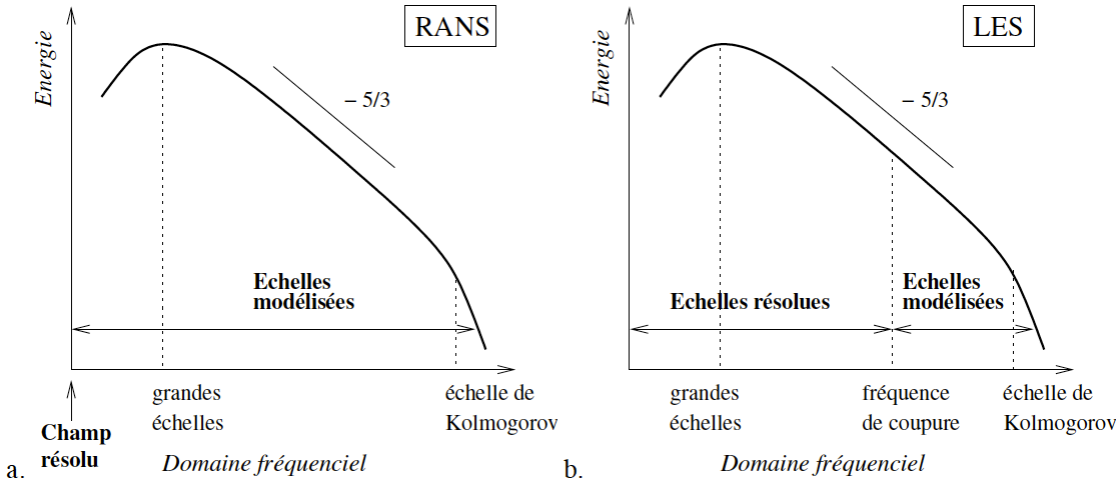

Figure 3.2 : *Représentation conceptuelle des méthodes RANS (a.) et LES (b.) appliquées à une turbulence homogène isotrope.*

Fig. 3.2. Les échelles les plus petites de la turbulence peuvent être modélisées de manière universelle car la forme des grandes structures particulières de l'écoulement est en quelque sorte oubliée ou amortie au cours de la cascade turbulente. Les quantités LES filtrées sont définies par le produit de convolution entre une quantité scalaire non-filtrée f et un filtre $G_{\bar{\Delta}}$ de taille caractéristique $\bar{\Delta}$, tel que :

$$\bar{f}(x_i,t) = \int f(x_i,t) G_{\bar{\Delta}}(x_i - x_i') dx_i \tag{3.28}$$

La contribution non-résolue (ou dite de "sous-maille") est obtenue par la relation suivante :

$$f'(x_i,t) = f(x_i,t) - \bar{f}(x_i,t) \tag{3.29}$$

Pour un écoulement de masse volumique variable, comme cela est le cas dans un écoulement réactif, il est avantageux de pondérer les quantités filtrées par la masse volumique du mélange, afin d'éviter l'apparition de termes additionnels lors de l'opération de filtrage des équations de Navier-Stokes. Ce filtrage particulier, appelé filtrage au sens de "Favre", est défini par :

$$\bar{\rho}\widehat{f} = \overline{\rho f} \tag{3.30}$$

3.4 Système d'équations LES

En appliquant le filtrage de Favre (Eq. 3.30) au système d'équations conservatives, on obtient le système d'équations LES [162] :

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\,\widehat{u}_i}{\partial x_i} = S_m^{l\to g} \tag{3.31}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\,\widehat{u_j}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho}\,\widehat{u_i}\,\widehat{u_j}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}[\overline{P} + \overline{\tau_{ij}} - \overline{\rho}(\widehat{u_i u_j} - \widehat{u_i}\widehat{u_j})] - S^{l\to g}_{qdm,i}\,, \tag{3.32}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\,\widehat{Y_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho}\,\widehat{Y_k}\,\widehat{u_i}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}[\overline{\rho V_{k,i} Y_k} + \overline{\rho}(\widehat{u_i Y_k} - \widehat{u_i}\widehat{Y_k})] + \overline{\dot{\omega}_k} + S^{l\to g}_{k}\,, \tag{3.33}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\,\widehat{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\,\widehat{E}\,\widehat{u_j}) = -\frac{\partial}{\partial x_j}[\overline{u_i\,(P\,\delta_{ij} - \tau_{ij})} + \overline{\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}} - \overline{\rho\sum_{k=1}^{N} h_{s,k} Y_k V_{k,i}} - \overline{\rho}(\widehat{u_i E} - \widehat{u_i}\widehat{E})] + \overline{\dot{\omega}_T} + S^{l\to g}_{E}\,, \tag{3.34}$$

Les termes $S^{l\to g}_{*}$ correspondent aux termes sources liés au couplage avec la phase liquide dispersée, détaillés en Sect. 4.2.

Les flux de diffusion filtrés pour les espèces $\overline{\rho V_{k,i} Y_k}$ et pour la chaleur $\overline{\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}}$ sont approchés par un gradient :

$$\overline{\rho V_{k,i} Y_k} \approx -\overline{\rho}\,\overline{\mathcal{D}}_k \frac{\partial \widehat{Y_k}}{\partial x_k} \tag{3.35}$$

$$\overline{\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}} \approx \overline{\lambda}\frac{\partial \widehat{T}}{\partial x_i} \tag{3.36}$$

Les autres termes du système d'équations ne peuvent être résolus directement, et nécessitent l'utilisation de modèles.

3.4.1 Tenseur des contraintes de Reynolds non-résolu - Modèle WALE

Le tenseur des contraintes de Reynolds non-résolu $\overline{\rho}(\widehat{u_i u_j} - \widehat{u_i}\widehat{u_j})$ décrit les flux d'énergie entre les échelles résolues et non résolues de la turbulence et est fermé grâce au modèle WALE (pour 'wall adapting linear eddy') développé par Nicoud et Ducros [155] en particulier pour les écoulements proche paroi. Dans ce modèle, de manière analogue au modèle classique de Smagorinsky [191], on fait d'abord l'hypothèse que les effets de sous-maille sont uniquement d'ordre dissipatif, en s'appuyant sur la théorie de la cascade énergétique de Kolmogorov. En introduisant la notion de viscosité turbulente, on décrit le tenseur des contraintes de Reynolds non-résolu par le modèle de sous-maille suivant :

$$\overline{\rho}(\widehat{u_i u_j} - \widehat{u_i}\widehat{u_j}) = 2\overline{\rho}\nu_t\widehat{S_{ij}} - \frac{1}{3}\tau^t_{ll}\delta_{ij} \tag{3.37}$$

où ν_t est la viscosité turbulente de sous-maille et $\widehat{S_{ij}}$ est le tenseur de déformations résolu :

$$\widehat{S_{ij}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widehat{u_i}}{\partial x_j}\right) + \frac{\partial \widehat{u_j}}{\partial x_i} - \frac{1}{3}\frac{\partial \widehat{u_k}}{\partial x_k}\delta_{ij} \tag{3.38}$$

Dans le modèle de Smagorinsky [191], la viscosité turbulente est évaluée par :

$$\nu_t = (C_S\triangle)^2\sqrt{2\widehat{S_{ij}}\widehat{S_{ij}}} \tag{3.39}$$

où C_S est un constante du modèle fixé à 0,18 et $\triangle$ une longueur caractéristique de l'élément de maillage (taille du filtre LES).

Dans le modèle WALE, pour améliorer le comportement du modèle proche des parois, la viscosité turbulente est évaluée par :

$$\nu_t = (C_w \triangle)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\widehat{S}_{ij}\widehat{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \tag{3.40}$$

où C_w est une constante fixé à $0,4929$. s_{ij}^d est la partie déviatorique du taux de déformation résolu :

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2}\left(\widehat{g}_{ij}^2 + \widehat{g}_{ji}^2\right) - \frac{1}{3}\,\widehat{g}_{kk}^2\,\delta_{ij} \tag{3.41}$$

où $\widehat{g}_{ij}$ est la partie irrationnelle du tenseur des contraintes résolu.

3.4.2 Transport d'espèces et chaleur non résolus

Les transports turbulents d'espèces $\overline{\rho}(\widehat{u_i Y_k} - \widehat{u}_i\widehat{Y_k})$ et de chaleur $\overline{\rho}(\widehat{u_i E} - \widehat{u}_i\widehat{E})$ sont modélisés par un opérateur de diffusion, en introduisant un nombre de Schmidt turbulent $\mathcal{S}_{c_t}$ et un nombre de Prandtl turbulent $\mathcal{P}_{r_t}$, tels que :

$$\overline{\rho}(\widehat{u_i Y_k} - \widehat{u}_i\widehat{Y_k}) = -\overline{\rho}\left(\mathcal{D}_k^t \frac{W_k}{W}\frac{\partial \widehat{X}_k}{\partial x_i} - \widehat{Y_k}\widehat{V_i}^{c,t}\right) \tag{3.42}$$

$$\overline{\rho}(\widehat{u_i E} - \widehat{u}_i\widehat{E}) = \lambda_t \frac{\partial \widehat{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \overline{\rho}(\widehat{u_i Y_k} - \widehat{u}_i\widehat{Y_k})\,\widehat{h}_{s,k}, \tag{3.43}$$

où

$$\mathcal{D}_k^t = \frac{\nu_t}{\mathcal{S}_{c_t}} \tag{3.44}$$

$$\lambda_t = \frac{\nu_t\,\overline{\rho}\,\overline{C_P}}{\mathcal{P}_{r_t}}. \tag{3.45}$$

$$V_i^{c,t} = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{D}_k^t \frac{W_k}{W}\frac{\partial \widehat{X_k}}{\partial x_i} \tag{3.46}$$

Les valeurs sont classiquement posées à $\mathcal{S}_{c_t} = 0,6$ et $\mathcal{P}_{r_t} = 0,6$. En général, $\mathcal{D}_k^t >> \mathcal{D}_k$ et $\lambda^t >> \lambda$, donc les flux de diffusion filtrés pour les espèces et la chaleur peuvent être négligés devant les forts niveaux de turbulence.

3.4.3 Taux de réaction filtrés - modèle de flamme épaissie TFLES

Les taux de réaction filtrés $\overline{\dot{\omega}_k}$ nécessitent plusieurs choix pour leur modélisation. Tout d'abord, il est nécessaire de choisir une description de la cinétique chimique. De plus, l'interaction forte

entre chimie et mélange turbulent nécessite de résoudre cette interaction à l'échelle résolue, et de la modéliser à l'échelle de sous-maille. Plusieurs approches, évoqués en Sect. 2.4.2.3, existent pour modéliser la combustion turbulente en LES. Dans le cadre de cette thèse, c'est l'approche de flamme épaissie TFLES qui est retenue. Comme l'épaisseur d'une flamme prémélangée δ_L^0 est généralement plus petite que la taille de maille standard d'un maillage LES, la bonne résolution spatiale du front de flamme nécessite un traitement particulier : le modèle de flamme épaissie TFLES permet de résoudre un front de flamme sur un maillage LES (Fig. 3.3), en épaississant fictivement la flamme tout en conservant ses principales caractéristiques.

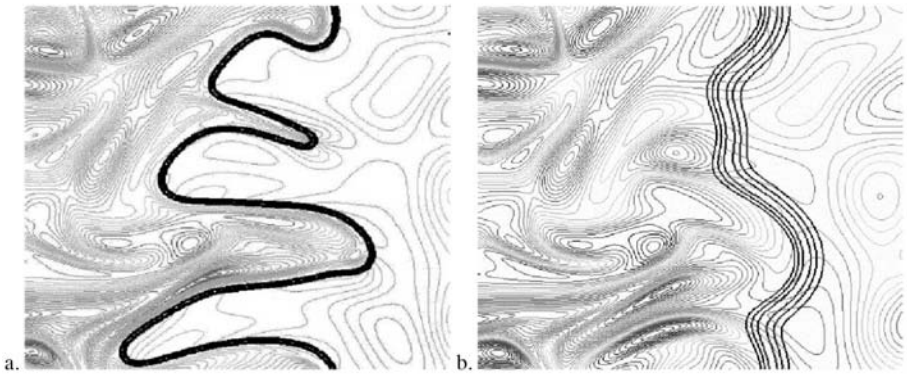

Figure 3.3 : *Illustration d'un front de flamme épaissie (droite) afin d'être résolu sur le maillage LES. On notera le défaut de plissement de la flamme associé à l'opération d'épaississement, qui est récupéré à travers le modèle d'efficacité.*

L'analyse dimensionnelle [220] montre que la vitesse de flamme laminaire S_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 sont toutes deux contrôlées par les termes sources diffusifs et réactifs tel que :

$$S_L^0 \propto \sqrt{\mathcal{D}_{th} A} \tag{3.47}$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{\mathcal{D}_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{\mathcal{D}_{th}}{A}} \tag{3.48}$$

où A est le facteur pré-exponentiel de la réaction d'Arrhenius. Pour une flamme laminaire épaissie, les diffusivités d'espèces et de chaleur $\mathcal{D}_{th}$ et $\mathcal{D}_k$ sont remplacés par $\mathcal{F}\,\mathcal{D}_{th}$ et $\mathcal{F}\,\mathcal{D}_k$ et le terme de réaction $\dot{\omega}_k$ par $\dot{\omega}_k/\mathcal{F}$, où $\mathcal{F}$ et le facteur d'épaissement.

Les équations 3.47 et 3.48 montrent que la vitesse de flamme laminaire est conservée par la procédure d'épaississement tandis que l'épaisseur est multipliée par un facteur $\mathcal{F}$. Pendant le calcul, un senseur localise les zone de réaction où l'épaississement doit être appliqué. Le facteur d'épaississement local $\mathcal{F}$ est déterminé de sorte que la flamme est résolue spatialement sur le maillage LES.

Une fonction d'efficacité additionnelle est appliquée au terme de réaction pour prendre en compte l'effet de la turbulence non résolue sur le front de flamme épaissi [49], notamment en rendant compte de la surface de flamme additionnelle de sous-maille, entraînant un taux de réaction

réel plus important. Cette correction consiste à multiplier le taux de réaction par une fonction d'efficacité E. La fonction d'efficacité développée par Charlette et Meneveau [36] sera utilisée dans la suite et s'écrit :

$$E = \left(1 + min\left[\frac{\Delta x}{l_D}, \Gamma \frac{u'_{\Delta x}}{S_l^0}\right]\right)^{\beta} \tag{3.49}$$

où S_l^0 est la vitesse de flamme (évaluée à la stoechiométrie), $\beta = 0,5$ et Γ une fonction qui tient compte de l'effet d'étirement de toutes les échelles turbulents plus petites que Δx :

$$\Gamma = 0,75\ exp\left[-\frac{1,2}{(u/S_l^0)^{0,3}}\right]\left(\frac{\Delta x}{l_D}\right)^{2/3} \tag{3.50}$$

Le modèle TFLES n'est appliqué que dans les zones de réaction, grâce à un senseur de réaction valant 0 en dehors des zones de réactions, et croissant très rapidement vers 1 dans les zones de réaction.

Chapitre 4

Simulation du spray évaporant - Equations et modèles macroscopiques

Sommaire

4.1 Approche lagrangienne déterministe 77
4.1.1 Cadre et hypothèses de la modélisation 77
4.1.2 Système d'équations lagrangiennes 78
4.1.3 Couplage avec la phase gazeuse 79
4.1.4 Approche déterministe vs. approche stochastique 80
4.2 Modèles macroscopiques de l'évolution d'une goutte isolée 81
4.2.1 Dynamique d'une goutte isolée 81
4.2.2 Evaporation d'une goutte isolée 84
4.3 Fonctionnement d'AVBP et modèles utilisés dans la suite 94

Dans ce chapitre, l'approche lagrangienne déterministe (dites 'DPS' pour 'Discrete Particle Simulation') de suivi d'un spray est décrite dans un premier temps. Les modèles de fermeture pour la DPS, disponibles dans la littérature et qui permettent d'obtenir l'évolution d'une goutte isolée, sont ensuite présentés.

4.1 Approche lagrangienne déterministe

4.1.1 Cadre et hypothèses de la modélisation

Sous certaines hypothèses, il est possible de considérer rigoureusement les gouttes composant le spray comme des point-sources par rapport au gaz, c'est-à-dire des points matériels qui se déplacent dans l'espace en étant, dans le même temps, sources locales de carburant gazeux. Ces hypothèses sont les suivantes :

– Le spray peut être considéré comme dilué, c'est-à-dire que le volume occupé par le liquide et les collisions entre les gouttes sont négligeables. De plus, les interactions sans contact entre gouttes voisines sont être suffisamment faibles pour être également négligés.
– Les gouttes restent sphériques du fait de leur petite taille. En effet, pour les gouttes de petite taille, les forces de tension de surface deviennent rapidement prépondérantes par rapport aux autres forces extérieures modifiant la forme d'une goutte. La forme d'équilibre de la goutte est alors une sphère.

Sous ces hypothèses, on considère une goutte isolée comme un point dans l'espace qui subit les conditions environnantes évaluées à sa position, indicées par $f@p$ pour "fluide à la position de la particule" [187]. L'évolution de la position, de la vitesse, de la température de cette goutte est calculée en ce point, grâce à des modèles de fermeture macroscopiques, analytiques et/ou empiriques, détaillés en Chap. 4.2.

La phase liquide lagrangienne est ensuite couplée à la phase gazeuse, sous la forme de termes sources de masse, d'énergie et de quantité de mouvement introduits dans les équations régissant la phase gazeuse (Eqs. 3.31, 3.32, 3.33, 3.34). L'union des couplages gaz→liquide et liquide→gaz est appelée couplage double. Dans ce cadre, une hypothèse supplémentaire apparait : la perturbation du champ $f@p$ induite par les termes sources de la goutte doit être négligeable devant les perturbations dues aux autres gouttes environnantes. Cette hypothèse est nécessaire pour considérer que le champ $f@p$, correspondant à l'environnement à l'infini dans les modèles macroscopiques, est non perturbé du point de vue de cette goutte. L'erreur point-source associée au non respect de cette hypothèse est étudiée par Rangel *et al.* [168, 188] et fait l'objet d'une discussion en Sect. 6.

4.1.2 Système d'équations lagrangiennes

La trajectoire de chaque point-source est suivie au cours du temps, ainsi que l'évolution de la masse et de la température de la goutte que le point transporte, grâce au système d'équations suivant :

$$\frac{\mathcal{D}X_{p,i}}{\mathcal{D}t} = u_{p,i} \tag{4.1}$$

$$\frac{\mathcal{D}m_p u_{p,i}}{\mathcal{D}t} = F^{ext}_{i,p} \tag{4.2}$$

$$\frac{\mathcal{D}m_p}{\mathcal{D}t} = \dot{m}_p \tag{4.3}$$

$$\frac{\mathcal{D}m_p h_{s,p}}{\mathcal{D}t} = \dot{\Phi}_p \tag{4.4}$$

où l'indice p désigne l'identité du point-source, i est la coordonnée spatiale, X est la position, m est la masse et $\mathcal{D}/\mathcal{D}t$ est la dérivée particulaire. F^{ext}_p, $\dot{m}_p$ et $\dot{\Phi}_p$ correspondent respectivement aux forces extérieures agissant sur la goutte, à la variation de masse et d'énergie interne de la goutte, obtenues à partir des modèles macroscopiques détaillés en Sect. 4.2.

4.1.3 Couplage avec la phase gazeuse

Le couplage avec la phase gazeuse est obtenu en transférant de manière conservative les flux de masses $\dot{m}_{p,n}$, de quantité de mouvement $F^{ext}_{p,n}$ et d'énergie $\dot{\Phi}_{p,n}$ de chaque goutte n, aux équations gazeuses LES, par le biais des termes sources $S^{l\to g}_{*}$:

$$S^{l\to g}_{m} = \frac{1}{\Delta V}\sum_{n=1}^{N}\Psi_n(x_{p,n})\dot{m}_{p,n} \tag{4.5}$$

$$S^{l\to g}_{qdm,i} = \frac{1}{\Delta V}\sum_{n=1}^{N}\Psi_n(x_{p,n})\left(-m_{p,n}F^{ext}_{i,p,n} + \dot{m}_{p,n}u_{p,n,i}\right) \tag{4.6}$$

$$S^{l\to g}_{F} = \frac{1}{\Delta V}\sum_{n=1}^{N}\Psi_n(x_{p,n})\dot{m}_{p,n} \tag{4.7}$$

$$S^{l\to g}_{E} = \frac{1}{\Delta V}\sum_{n=1}^{N}\Psi_n(x_{p,n})\left(-m_{p,n}\vec{F}^{ext}_{p,n}\cdot\vec{u}_{p,n} + \frac{1}{2}\dot{m}_{p,n}\|\vec{u}_{p,n}\|^2 - \dot{\Phi}_{p,n}\right) \tag{4.8}$$

$$\tag{4.9}$$

où ΔV est le volume de contrôle du transfert, N le nombre de gouttes présentes dans ce volume et $\Psi_n(x_p)$ une fonction d'interpolation dépendante du maillage.

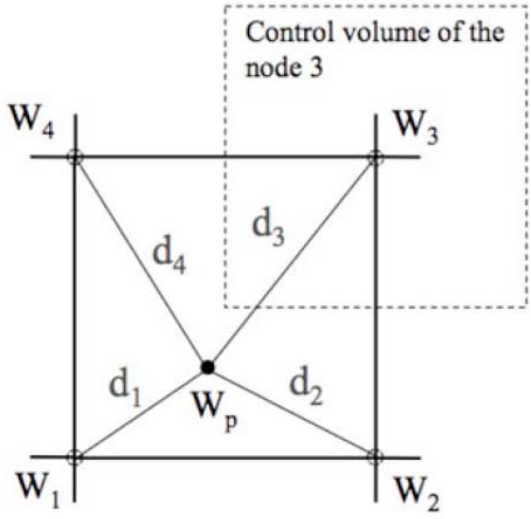

Figure 4.1 : *Exemple de projection des termes sources issus d'une goutte sur les sommets d'un élément carré.*

Pour les maillages non structurés, l'interpolation est effectuée avec les sommets de l'élément de maillage qui contient la goutte, avec des poids inversement proportionnelle à la distance entre la

goutte et les sommets de l'élément (Fig. 4.1) :

$$\Psi_{n,j}(x_p) = \frac{1/d_j}{\sum_{k'=1,N_v} 1/d'_k} \tag{4.10}$$

où j est l'indice du sommet de l'élément et N_v le nombre de sommet. Ici, le volume de contrôle est égal au volume nodale, c'est à dire le volume fictif entourant un sommet.

4.1.4 Approche déterministe vs. approche stochastique

On parle d'approche lagrangienne déterministe lorsque chaque goutte du spray est suivie individuellement dans sa trajectoire et dans l'évolution de ses conditions internes. Si le spray peut être composé d'un trop grand nombre de gouttes, l'approche DPS peut devenir beaucoup trop onéreuse en temps de calcul.

Pour les très grands nombres de gouttes composant un spray, une description stochastique du spray est plus adaptée pour deux raisons principales. D'abord, il n'y a pas d'intérêt pratique particulier à connaitre exactement la vie de chaque goutte formant le spray [1], mais plutôt à obtenir un comportement global du spray, obtenu à partir de la moyenne de toutes les contributions locales instationnaires de chaque goutte. Ensuite, la convergence statistique des méthodes lagrangiennes dans les zones de l'écoulement très peu denses en goutte, est généralement très lente, donc coûteuse, comme analysé en Chap. 7, mais peut être améliorer par une approche stochastique adaptée.

Les approches lagrangiennes stochastiques font appel à des modèles de fermetures particuliers, non détaillés ici, et consiste généralement à transporter un nombre de point-sources inférieur au nombre réel de gouttes du spray, mais contenant les informations statistiques essentielles du spray. Elles sont donc généralement moins coûteuses qu'une approche déterministe, mais nécessite la construction de modèles de fermeture stochastique précis.

Une approche intermédiaire à cette approche stochastique consiste à conserver une approche déterministe tout en réduisant le nombre de gouttes du spray, en considérant qu'un point source calculé représente non plus une seule goutte, mais plutôt un groupe de gouttes ayant le même diamètre et la même évolution. Cette procédure permet de réduire le nombre de point-sources utilisés pour décrire le spray tout en conservant des modèles de fermeture déterministes, et ainsi réduire le coût de calcul de la phase liquide lagrangienne. En revanche, elle peut introduire un écart à l'approche déterministe de référence si le nombre de gouttes calculées décrivant le spray devient trop faible. Dans ce cas, il est nécessaire de s'orienter vers une véritable approche lagrangienne stochastique.

1. De manière analogue au fait de décrire l'évolution d'un gaz par la description de l'évolution de chacune de ses molécules.

4.2 Modèles macroscopiques de l'évolution d'une goutte isolée

L'approche lagrangienne déterministe permet de ramener l'évolution du spray à l'évolution de gouttes isolées composant ce spray. La goutte isolée est un cas académique qui a fait l'objet d'une intense recherche dans les années 50-70, et permet d'obtenir des modèles macroscopiques permettant de fermer le système d'équation lagrangienne (Eqs. 4.1, 4.2, 4.3, 4.4). Dans cette partie, une description de la dynamique d'une goutte isolée est d'abord proposée. Un modèle simplifié d'évaporation de goutte isolée est ensuite décrit. Enfin, plusieurs approches permettant de raffiner ce modèle d'évaporation sont brièvement détaillées.

4.2.1 Dynamique d'une goutte isolée

L'étude de la dynamique d'une goutte évaporante peut être tout d'abord rapportée à celle d'une sphère rigide non évaporante dans un écoulement, en négligeant l'influence de l'évaporation sur la traînée de la goutte. En effet, l'évaporation d'une goutte peut ne pas être uniforme le long de la surface de la goutte et peut générer une force globale de poussée. Cette force peut raisonnablement être négligée puisque les variations surfaciques ne sont généralement pas suffisantes pour obtenir une force du même ordre de grandeur que les autres forces modifiant la trajectoire. Cette hypothèse simplifie beaucoup l'étude de la dynamique de la goutte isolée, en la rapportant à une sphère dure, permettant d'obtenir des modèles analytiques très simples. Les forces extérieures s'appliquant à la goutte s'obtiennent alors par intégration des équations de Navier-Stokes autour de la surface de cette sphère. Ces forces peuvent être séparées en deux catégories : les forces stationnaires, issues d'une situation bien établie autour de la goutte, et les forces instationnaires, liées à l'histoire de la goutte.

4.2.1.1 Force stationnaire de quantité de mouvement

4.2.1.1.1 Force de traînée stationnaire

La force de traînée stationnaire $\vec{F}_D$ est la force agissant sur la sphère, en l'absence d'accélération relative de la sphère par rapport à l'écoulement, dans un environnement à pression uniforme. Cette force est exprimée à l'aide d'un coefficient de traînée $\mathcal{C}_D$:

$$\vec{F}_D = \frac{1}{2}\rho_g \mathcal{C}_D A \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\|(\vec{u}_g - \vec{u}_p) \tag{4.11}$$

où ρ_g est la masse volumique du fluide environnant , $\vec{u}_g$ et $\vec{u}_p$ sont respectivement la vitesse du gaz et de la particule, et $A = \frac{\Pi d_p^2}{4}$ l'aire projetée de la sphère.

La principale difficulté réside dans la détermination du coefficient de traînée $\mathcal{C}_D$. En effet, $\mathcal{C}_D$ varie fortement avec la vitesse relative entre le fluide et la particule, comme illustré sur en Fig. 4.2. L'intensité de l'écoulement est exprimée sous la forme d'un nombre de Reynolds particulaire

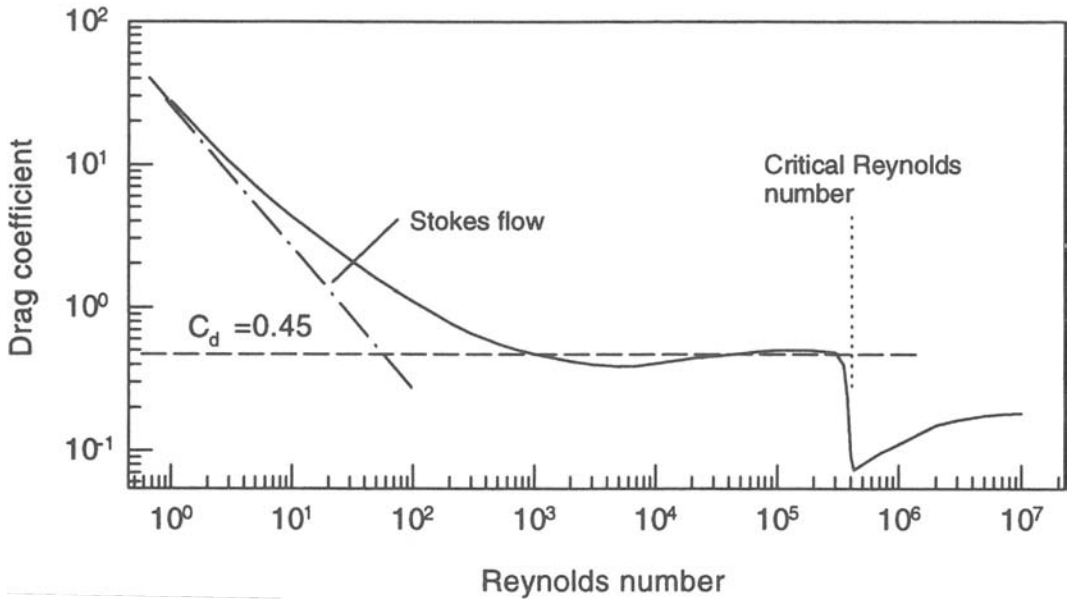

Figure 4.2 : *Variation du coefficient de traînée $\mathcal{C}_D$ en fonction du nombre de Reynolds particulaire $\mathcal{R}e_p$ (extrait de [51]).*

$\mathcal{R}e_p$, qui compare les forces inertielles aux forces visqueuses :

$$\mathcal{R}e_p = \frac{\rho_g d_p \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\|}{\mu_g} \tag{4.12}$$

avec d_p le diamètre de la sphère et μ_g la viscosité dynamique du gaz.

De manière générale, le coefficient de traînée $\mathcal{C}_D$ doit donc pouvoir rendre compte d'une très grande variété de phénomènes physiques. Cependant, dans une chambre de combustion, les vitesses relatives entre les gouttes et la phase gazeuse sont relativement faibles et les nombres de Reynolds particulaires restent généralement inférieurs à 500. Dans ce cadre restreint, Stokes exprime en 1851[51], la force de traînée s'appliquant à une sphère par intégration des équations de Navier-Stokes axi-symétriques, comme étant la somme de deux contributions. La première est liée à la déviation de l'écoulement gazeux, ce qui génère une surpression à l'avant de la sphère et une dépression à l'arrière. La deuxième est liée au frottement du gaz à la surface de la sphère. La somme de ces deux contributions fournit une évaluation du coefficient de traînée : $\mathcal{C}_D = \frac{24}{\mathcal{R}e_p}$. Une extension de cette analyse pour les faibles nombres de Reynolds particularise est proposée par Oseen [157], en prenant en compte les effets inertiels du premier ordre. :

$$\mathcal{C}_D = \frac{24}{\mathcal{R}e_p}\left(1 + \frac{3}{16}\mathcal{R}e_p\right) \quad \text{pour } \mathcal{R}e_p < 5 \tag{4.13}$$

Pour $\mathcal{R}e_p > 5$, il est plus difficile de développer une solution analytique. Des corrections s'appuyant sur des corrélations empiriques sont utilisées pour couvrir un domaine de Reynolds particulaire représentatif des applications usuelles [179, 48]. La plus utilisée pour les applications aéronautique est celle de Schiller et Naumann [179], qui donne de bons résultats pour des nombres de Reynolds particulaires inférieurs à 800 :

$$\mathcal{C}_D(\mathcal{R}e_p) = \frac{24}{\mathcal{R}e_p} f(\mathcal{R}e_p) \tag{4.14}$$

$$\text{avec} \quad f(\mathcal{R}e_p) = \quad (1 + 0,15\,\mathcal{R}e_p{}^{0,687}) \tag{4.15}$$

4.2.1.1.2 Force de pression stationnaire

Un gradient local de pression au niveau de la goutte génère une force dans la direction de ce gradient. Dans le cas particulier d'un gradient de pression hydrostatique (lié à la gravité par exemple), la force de pression associée est la force d'Archimède :

$$\vec{F}_P = -\rho_g\, \vec{g}\, V_p \tag{4.16}$$

où $\vec{g}$ est la gravité et V_p est le volume de la goutte. En considérant le gradient de pression hydrostatique et en combinant cette force à la force de gravité s'appliquant à la goutte $-m_p\vec{g}$, on obtient une force stationnaire telle que :

$$\vec{F}_P^{total} = \rho_l V_p \vec{g}\,(1 - \frac{\rho_g}{\rho_l}) \tag{4.17}$$

où ρ_l est la masse volumique de la particules.

Dans le cas d'une goutte de carburant immergée dans un gaz, le rapport de masse volumique ρ_g/ρ_l est de l'ordre de 10^{-3}. La force d'Archimède, liée au gradient de pression hydrostatique, est donc dans ce cas négligeable devant le poids de la goutte.

4.2.1.2 Force instationnaire de quantité de mouvement - Equations de Basset-Boussinesq-Oseen généralisées

Basset [13], Boussinesq [28] et Oseen [157] étudient l'écoulement autour d'une particule en chute libre et dérivent une expression analytique des forces s'appliquant à la particule dans cet écoulement. Leur dérivation fait apparaître deux autres forces instationnaires liées à l'histoire de la particule :

$$F_{D,i}^{inst.} = \frac{\rho_g}{2}\frac{d}{dt}(u_{g,i} - u_{p,i}) + \frac{9\rho_g}{d_p}\sqrt{\frac{\nu_g}{\pi}}\int_{-\infty}^{t}\frac{d}{d\tau}(u_{g,i} - u_{p,i})\frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}}\Bigg] \tag{4.18}$$

où i est la composante spatiale, $F_{D,i}^{inst.}$ correspond à la force instationnaire globale.

Le premier terme correspond à la force dite de "masse ajoutée", qui prend en compte les effets d'accélération/décélération du fluide environnant par la particule. Le deuxième terme correspond

à la force de Basset, qui prend en compte le délai d'installation de la couche limite à la surface de la particule qui accélère relativement à l'écoulement, processus fondamentalement instationnaire.

Pour les écoulements ciblés dans cette thèse, dont le rapport des masses volumiques est très petit ($\rho_g/\rho_l \approx 10^{-3}$), ces deux forces instationnaires peuvent être raisonnablement négligées [51].

4.2.1.3 Equations de quantité de mouvement, temps caractéristiques de la dynamique et nombre de Stokes

L'équation lagrangienne 4.2 s'écrit finalement :

$$\frac{\mathcal{D}u_{p,i}}{\mathcal{D}t} = \frac{1}{\tau_p}(u_{g,i} - u_{p,i}) + g_i \tag{4.19}$$

Cette équation différentielle du premier ordre fait apparaitre un temps caractéristique τ_p défini par :

$$\tau_p = \frac{\rho_l \, d_p^2}{18 \, \mu_g \, f(\mathcal{R}e_p)} \tag{4.20}$$

Comme tout système du premier ordre, à $t = \tau_p$, la particule a atteint environ 63 % de la vitesse stationnaire de la phase gazeuse porteuse. Le comportement inertiel d'une particule peut être estimé en comparant τ_p à un temps caractéristique de l'écoulement porteur, noté τ_g. Ce dernier peut être basé sur un temps lié à la turbulence ou à l'inverse d'une fréquence particulière de l'écoulement (cf. Sect. 2.2.2 et 2.4.2.3.1), selon la caractéristique de l'écoulement par rapport à laquelle on souhaite comparer le comportement inertiel de la goutte. Le rapport de ces deux temps définit le nombre de Stokes $\mathcal{S}_t$:

$$\mathcal{S}_t = \frac{\tau_p}{\tau_g} \tag{4.21}$$

Pour des grands nombres de Stokes ($\mathcal{S}_t \gg 1$), la particule est très peu sensible à la variation de vitesse de l'écoulement, et suit la trajectoire dictée par son inertie. Au contraire, une particule à faible nombre de Stokes ($\mathcal{S}_t \ll 1$) suit l'écoulement, tel que le ferait un traceur [2].

4.2.2 Evaporation d'une goutte isolée

Considérons une goutte isolée s'évaporant dans un environnement au repos, dont la température est supérieure à celle de la goutte. Des échanges thermiques et massiques se mettent en place à la surface de la goutte. L'évaporation fait intervenir deux processus successifs principaux. Dans un premier temps, la chaleur environnante diffuse par conduction à l'intérieur de la goutte, à l'origine d'une montée en température de la goutte. Cette augmentation qui génère une croissance de

2. particule d'ensemencement, utilisée expérimentalement pour tracer l'écoulement fluide

l'énergie interne des molécules de carburant composant la goutte, entraîne un détachement moléculaire au niveau de l'interface liquide-gaz. Cette émission moléculaire génère une augmentation de la quantité de vapeur de carburant à la surface de la goutte. Dans un deuxième temps, cette vapeur gazeuse diffuse dans le milieu environnant, plus pauvre en carburant. La modélisation du premier processus est mathématiquement beaucoup plus complexe que celle du second processus. De ce fait, les approches les plus classiques ne modélisent précisément que le deuxième processus, et ne tiennent pas compte des subtilités du changement de phase à l'interface. Dans le cadre de cette étude, l'erreur associée à cette simplification peut être raisonnablement négligée [120]. Pour une approche à l'échelle moléculaire de l'évaporation, le lecteur pourra se référer à [111].

Le développement d'un modèle d'évaporation analytique nécessite de supposer que l'interface liquide-gaz est à l'équilibre thermodynamique : au niveau de la surface de goutte, le flux de molécules passant de l'état liquide à l'état gazeux est égal au flux de molécules passant de l'état gazeux à l'état liquide. Cette simplification permet d'obtenir la quantité de vapeur de carburant à la surface de la goutte, pour des conditions environnantes données, car le taux d'évaporation de la goutte découle alors directement d'un problème convecto-diffusif de ce carburant gazeux, de la surface de la goutte vers le milieu environnant.

Dans la suite, le modèle classique d'évaporation, dit de Spalding ([193, 188, 121], est présenté. La dérivation de ce modèle est à la base de la plupart des modèles d'évaporation plus avancés, dont certains sont rapidement présentés de manière non exhaustive.

4.2.2.1 Modèle d'évaporation de Spalding

Le système d'équations décrivant l'évaporation d'une goutte peut être résolu analytiquement avec les hypothèses suivantes :

- H1 : la goutte est considérée comme sphérique et isolée, c'est-à-dire que l'interaction avec les gouttes voisines peut être négligée.
- H2 : la conductivité thermique à l'intérieur de la goutte est considérée comme infinie. La température à l'intérieur de la goutte est donc uniforme. Cette hypothèse est justifiée par le fait que la conductivité thermique d'un liquide est généralement un ordre de grandeur supérieure à la conductivité thermique du gaz. De ce fait, le temps caractéristique d'homogénéisation de la température du liquide est plus rapide que l'adaptation thermique gazeuse. Dans une première approche, il est donc possible d'éviter la résolution de l'écoulement interne de la goutte en effectuant un bilan thermique à travers la surface de la goutte.
- H3 : l'environnement gazeux et la goutte sont au repos et l'évolution de la phase gazeuse est supposée quasi-statique, c'est à dire présentant une succession d'états d'équilibre. Cette hypothèse très forte peut se justifier par le fait que la masse volumique du liquide est très supérieure à celle du gaz ($\rho_l >> \rho_g$). Ainsi, d'une part, la vitesse de récession de la surface du fait de l'évaporation est très petite devant la vitesse du flux de vapeur qui s'en échappe.

D'autre part, les variations thermiques de la goutte sont lentes comparées aux variations thermiques du gaz environnant. On peut donc considérer la position de la surface de la goutte comme statiques à un instant donné. Les équations de la phase gazeuse se réduisent à un équilibre convecto-diffusif gazeux. Un bilan massique et thermique de la goutte permet d'obtenir l'évolution temporelle des caractéristiques de la goutte.

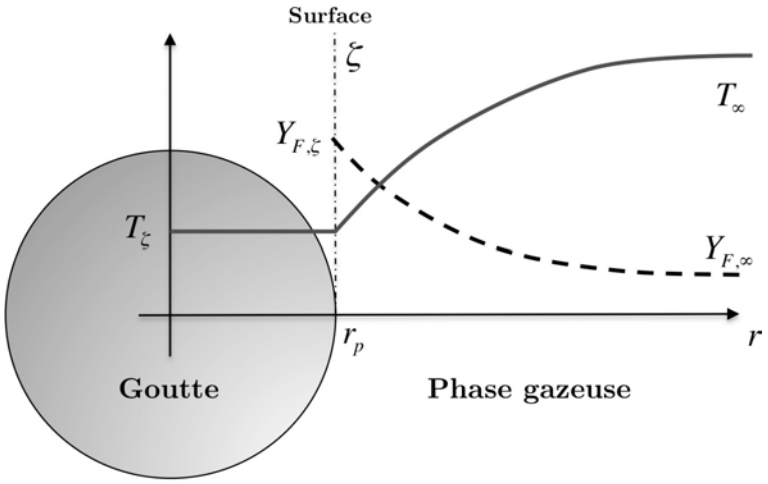

Figure 4.3 : *Profil radial de la température T et de la fraction massique de carburant gazeux Y_F pour une goutte sphérique à température uniforme $T_p = T_\zeta$ (pas de stockage d'énergie à la surface).*

Grâce à ces hypothèses, les équations de la phase gazeuse peuvent être traitées sous forme quasi-statique et en coordonnées sphériques, du fait de la symétrie sphérique de la configuration (Fig. 4.3). Seules les variations en coordonnées radiales sont donc considérées.

Les équations de conservation de la quantité de mouvement, des espèces et de l'énergie gazeuses sont écrites entre la surface de la goutte (notée ζ) et le champ lointain (noté ∞) :

$$\rho u r^2 = \text{constant} = \frac{\dot{m}_F}{4\pi} \tag{4.22a}$$

$$\rho u r^2 \frac{dY_F}{dr} = \frac{d}{dr}\left(r^2 [\rho \mathcal{D}_F] \frac{dY_F}{dr} \right) \tag{4.22b}$$

$$\rho u r^2 \frac{dC_P T}{dr} = \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{\lambda}{C_P} \frac{dC_P T}{dr} \right) \tag{4.22c}$$

où r désigne la coordonnée radiale, $\dot{m}_F$ le flux de vapeur de carburant à la surface, Y sa fraction massique, $\mathcal{D}_k$ sa diffusivité, λ la diffusivité thermique et C_P la capacité calorifique à pression constante du mélange. L'indice g qui désigne les variables gazeuses a été volontairement omis pour plus de lisibilité. L'apparition des quantités $\rho\mathcal{D}_F$ et λ/C_P implique une hypothèse supplémentaire : ces deux quantités sont supposées constantes radialement, c'est-à-dire indépendantes de la température et du mélange local. Cette hypothèse est nécessaire pour permettre de dériver un modèle analytique, mais introduit une erreur. Le résultat est relativement sensible à la valeur de ces deux

quantités. En première approximation, ces quantités sont évalués au champs lointain. D'autres choix permettent de les déterminer plus judicieusement (Sect. 4.2.2.2.5).

L'intégration du modèle d'évaporation se fait en deux étapes. Dans un premier temps, l'évolution temporelle de la masse de la goutte est déterminée. Dans un deuxième temps, l'évolution temporelle de la température de la goutte est obtenue grâce à un bilan d'énergie.

4.2.2.1.1 Evolution de la masse de la goutte - transfert massique

Comme l'interface liquide/gaz ne stocke pas de masse, tout flux de vapeur de carburant se traduit par une perte de masse liquide pour la goutte, par conservation de la masse à travers la surface. Cette conservation se traduit par la relation $\dot{m}_F = -\dot{m}_p$, où $\dot{m}_p$ est la variation de la masse de la goutte (ou taux d'évaporation).

En intégrant l'Eq. (4.22b) deux fois entre la surface de la goutte et le champ lointain, une expression du taux d'évaporation peut être obtenue :

$$\dot{m}_p = -2\pi d_p \left[\rho \mathcal{D}_F\right] ln\left(B_M + 1\right) \quad \text{avec} \quad B_M = \frac{Y_{F,\zeta} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\zeta}} \tag{4.23}$$

L'équation fait apparaître le nombre de Spalding de transfert de masse B_M.

L'équation montre que le taux d'évaporation quasi-statique est entièrement déterminé par les conditions à la surface de la goutte et à l'infini. Les conditions du champ lointain sont connues par définition, tandis que les conditions à la surface ne le sont pas *a priori*. Il est néanmoins possible d'obtenir facilement la valeur de la fraction massique de carburant à la surface de la goutte $Y_{F,\zeta}$, en considérant que l'interface est en équilibre thermodynamique. Cette hypothèse permet d'utiliser la relation de Clausius-Clapeyron :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{cc}}{P}\ exp\left(\frac{W_F L_v(T_{ref})}{\mathfrak{R}}\left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\zeta}\right)\right) \tag{4.24}$$

où l'indice cc fait référence à un point arbitraire sur la courbe de saturation et $L_v(T_{ref})$ est la chaleur latente de vaporisation évaluée à la température de référence T_{ref}. Comme l'interface ne stocke pas d'énergie, la température à travers la surface est continue, ce qui implique que T_ζ est égale à la température (uniforme) de la goutte, T_p. La fraction massique $Y_{F,\zeta}$ se déduit ensuite de la fraction molaire $X_{F,\zeta}$.

Eq. (4.23) montre aussi que le taux d'évaporation $\dot{m}_p$ dépend essentiellement de la température de la goutte T_p et du rayon de la goutte d_p, qui varient au cours du temps de manière quasi-statique par rapport au gaz. Leur évolution temporelle est établie dans les paragraphes suivants.

4.2.2.1.2 Décroissance temporelle du diamètre - loi du d^2

L'évolution temporelle de d_p se déduit simplement de celle de $\dot{m}_p$. En effet, par définition, le taux d'évaporation de la goutte vérifie :

$$\dot{m}_p = \frac{d}{dt}\left[\frac{4}{3}\pi\rho_l r_p^3\right] \tag{4.25}$$

qui permet d'obtenir la variation du carré du diamètre de la goutte à partir de l'Eq. (4.23) :

$$d_p^2 = d_{p,0}^2 - \frac{8\rho_g \mathcal{D}_F}{\rho_l} ln\left(B_M + 1\right) \times t \tag{4.26}$$

où $d_{p,0}$ est le diamètre initial de la goutte.

Lorsque la température de la goutte T_p est constante, le facteur $\frac{8\rho_g \mathcal{D}_F}{\rho_l} ln\left(B_M + 1\right)$ est constant et la décroissance du diamètre d_p^2 est linéaire, suivant la loi classique d'évaporation en d^2. L'équation (4.26) permet aussi d'évaluer le temps d'évaporation :

$$\tau_{evap} = \frac{\rho_l d_{p,0}^2}{8\,\rho_g \mathcal{D}_F\, ln\left(B_M + 1\right)} \tag{4.27}$$

4.2.2.1.3 Evolution de la température de la goutte - transfert thermique

L'évolution de la température de la goutte s'obtient en effectuant un bilan d'enthalpie pour la goutte :

$$\frac{d}{dt}(m_p h_{s,l}(T_p)) = \Phi_l^c + \Phi_l^{cv} \tag{4.28}$$

où Φ^c et Φ^{cv} sont respectivement les flux conductif et convectif à la surface de la goutte, et $h_{s,l}$ est l'enthalpie sensible de la goutte.

Pour obtenir une expression de ces flux, un bilan de flux thermique est effectué à la surface de la goutte. Comme l'interface ne stocke pas d'énergie, un équilibre existe entre flux conductif et convectif, liquide et gazeux, à la surface :

$$\Phi_l^{cv} + \Phi_l^c + \Phi_g^{cv} + \Phi_g^c = 0 \tag{4.29}$$

Les flux convectifs Φ^{cv} correspondent au transfert d'enthalpie lié au changement de phase et s'écrivent :

$$\Phi_g^{cv} = \dot{m}_F h_{s,g}(T_\zeta) \tag{4.30}$$

$$\Phi_l^{cv} = \dot{m}_p h_{s,l}(T_p) \tag{4.31}$$

L'introduction de la chaleur latente d'évaporation L_v, de la continuité de la température à la surface $T_\zeta = T_p$ et de la conservation de la masse permet d'écrire la relation suivante :

$$\Phi_l^{cv} + \Phi_g^{cv} = -\dot{m}_p\, L_v(T_p) \tag{4.32}$$

où $L_v(T_p) = h_{s,g}(T_p) - h_{s,l}(T_p)$. Le flux conductif gazeux Φ_g^c s'écrit par définition :

$$\Phi_g^c = \left(4\pi r^2 \frac{\lambda}{C_P} \frac{dC_P T}{dr}\right)\Big|_{\zeta^+} \tag{4.33}$$

où ζ^+ correspond au côté gazeux de l'interface.

Le flux conductif liquide Φ_l^c est indéfini à l'interface car la conductivité thermique est considérée infinie et la température liquide constante. Cependant, sa valeur peut être obtenue grâce à l'équation (4.29) :

$$\Phi_l^c = -\Phi_g^c + \dot{m}_p\, L_v(T_\zeta) \tag{4.34}$$

Pour obtenir l'évolution de la température de la goutte, on sépare les variables dans l'équation (4.28) et on y introduit les équations (4.31) et (4.34), pour obtenir :

$$\frac{d\, C_{p,l} T_p}{d\, t} = \frac{1}{m_p}\left(-\Phi_g^c + \dot{m}_p L_v(T_p)\right) \tag{4.35}$$

Finalement pour déterminer le flux conductif gazeux Φ_g^c donné par l'Eq. (4.33), la variation radiale de la température du gaz est obtenue par l'intégration de l'équation d'énergie (4.22c).

Une première intégration de (4.22c) en prenant en compte la condition limite à la surface fournit la relation suivante :

$$\dot{m}_F\left(C_P(T)T - C_P(T_\zeta)T_\zeta\right) = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{C_P}\left[\frac{dC_P T}{dr}\right] - 4\pi r_\zeta^2 \frac{\lambda}{C_P}\left[\frac{dC_P T}{dr}\right]_\zeta \tag{4.36}$$

où $r_\zeta = r_p$. Le terme de droite correspond justement à l'inconnue Φ_g^c (voir Eq. 4.33). Une deuxième intégration, avec application de la condition aux limites en champ lointain permet d'obtenir la relation suivante :

$$\dot{m}_F = \; 4\pi r_p \frac{\lambda}{C_P} ln\left(B_T + 1\right) \tag{4.37}$$

où le nombre de Spalding de transfert de chaleur B_T a été introduit :

$$B_T = \frac{\left(C_P(T_\infty)T_\infty - C_P(T_\zeta)T_\zeta\right)\dot{m}_F}{-\Phi_g^c} \tag{4.38}$$

Le fait d'avoir deux expressions pour $\dot{m}_F = -\dot{m}_p$ en fonction de B_M et B_T (Eqs. 4.23 et 4.37) permet d'obtenir une relation entre ces deux nombres :

$$B_T = (1 + B_M)^{\frac{1}{\mathcal{L}e_F}} - 1 \tag{4.39}$$

où le nombre de Lewis $\mathcal{L}e_F = \lambda/(C_P\, \rho \mathcal{D}_F)$ compare la diffusion du carburant et la diffusion thermique.

Φ_g^c est obtenu en utilisant Eqs. (4.37) et (4.38), en fonction des grandeurs connues à la surface et en champ lointain :

$$\Phi_g^c = 2\pi d_p \frac{\lambda}{C_P}\left(C_P(T_\zeta)T_\zeta - C_P(T_\infty)T_\infty\right)\frac{ln(B_T+1)}{B_T} \tag{4.40}$$

Finalement, en introduisant l'équation (4.40) dans (4.35), l'évolution temporelle de la goutte s'écrit :

$$\frac{d\,C_{p,l}T_p}{d\,t} = \frac{1}{m_p}\left(\dot{m}_p L_v(T_p) - 4\pi r_p \frac{\lambda}{C_P}\left(C_P(T_p)T_p - C_P(T_\infty)T_\infty\right)\frac{ln(B_T+1)}{B_T}\right) \tag{4.41}$$

L'évolution temporelle d'une goutte suivant le modèle de Spalding est obtenue par intégration temporelle simultanée des équations (4.41) et (4.25) avec comme condition initiale un diamètre et une température de goutte.

Un cas particulier de ce modèle est intéressant à analyser. La goutte peut atteindre une température d'équilibre, qui correspond au cas où l'intégralité des flux de chaleur transmis à la goutte contribue au changement de phase, le préchauffage de la goutte étant fini. Lorsque la température ne varie plus en temps, Eq. 4.35 implique que $\Phi_g^c = \dot{m}_p L_v(T_p)$. La température à laquelle correspond la situation, est appelée température "humide" ("wet-bulb" en anglais) peut être obtenue par intégration du modèle de Spalding. Lorsqu'elle est atteinte, B_T, B_M et donc $\dot{m}_p$ sont constants, ce qui implique une variation linéaire du carré du diamètre de la goutte, qui correspond à la loi du d^2 (Eq. 4.26).

4.2.2.2 Améliorations du modèle d'évaporation de Spalding

4.2.2.2.1 Prise en compte de l'écoulement autour de la goutte

L'écoulement autour de la goutte n'est généralement pas au repos, comme supposé dans le modèle de Spalding. La présence de cet écoulement relatif entraine deux modifications principales par rapport au cas au repos :

- Lorsque le nombre de Reynolds particulaire (Eq. 4.12) est différent de zéro, il se forme une couche limite autour de la goutte, qui est plus ou moins complexe en fonction de la valeur de $\mathcal{R}e_p$: turbulence à la surface, présence de décrochages/ré-accorchages de l'écoulement etc. Cette couche limite est notamment responsable d'une augmentation des transferts de masse et de chaleur par rapport au cas au repos, en augmentant le mélange.
- L'écoulement introduit un cisaillement à la surface de la goutte, qui entraîne des mouvements de circulation du liquide à l'intérieur de la goutte, tendant à homogénéiser la température de la goutte.

Le taux d'évaporation augmente donc avec l'intensité de la vitesse relative de la goutte par rapport à l'écoulement, et donc avec $\mathcal{R}e_p$.

Pour prendre en compte cette augmentation, l'approche la plus répandue consiste à corriger les taux d'évaporation et de transfert de chaleur obtenus au repos en introduisant les nombre de Sherwood et de Nusselt. La correction la plus répandue est proposée par Ranz et Marshall [169],

sous la forme suivante :

$$\mathcal{S}h = 2 + 0.55\,\mathcal{R}e_p^{1/2}\,(\mathcal{S}_c^F)^{1/3} \tag{4.42}$$

$$\mathcal{N}u = 2 + 0.55\,\mathcal{R}e_p^{1/2}\,\mathcal{P}_r^{1/3} \tag{4.43}$$

en modifiant les équations 4.23 et 4.40 de la façon suivante :

$$\dot{m}_p = -\mathcal{S}h\ \pi d_p\,[\rho\mathcal{D}_F]\,ln\,(B_M + 1) \tag{4.44}$$

$$\Phi_g^c = \mathcal{N}u\ \pi d_p \frac{\lambda}{C_P}\,(C_P(T_\zeta)T_\zeta - C_P(T_\infty)T_\infty)\,\frac{ln(B_T+1)}{B_T} \tag{4.45}$$

D'autres corrélations empiriques sont disponibles dans la littérature [66, 48].

Dans une autre approche, Abramzon et Sirignano [2] proposent de modifier les nombres de Sherwood et de Nusselt en incorporant la présence de la couche limite convective dans la dérivation du modèle d'évaporation. En utilisant la théorie du 'film' [20], qui permet de définir une épaisseur massique et thermique de la couche limite, les auteurs introduisent deux facteurs de correction F_M et F_T tels que, pour $k = M$ ou T :

$$F_k = (1 + B_k)^{0,7}\,\frac{ln(1+B)}{B} \tag{4.46}$$

Les nombres de Sherwood et de Nusselt corrigés prennent la forme suivante :

$$\mathcal{S}h^* = 2 + (\mathcal{S}h^0 - 2)/F_M \tag{4.47}$$

$$\mathcal{N}u^* = 2 + (\mathcal{N}u^0 - 2)/F_T \tag{4.48}$$

où $\mathcal{S}h^0$ et $\mathcal{N}u^0$ sont obtenus à partir des corrélations précédentes (Eqs 4.42 et 4.43). Ce modèle permet d'améliorer significativement les résultats du modèle.

4.2.2.2.2 Prise en compte de la non-uniformité de la température de la goutte

Dans le modèle de Spalding, l'hypothèse de la température uniforme de la goutte est relativement forte. En effet, les transferts thermiques s'effectuent à la surface de la goutte et ne sont pas instantanément transmis au centre de la goutte. Ainsi, pour une goutte suffisamment grosse, ce temps n'est pas négligeable devant les autres temps caractéristiques de décroissance du diamètre, d'adaptation thermique du gaz, etc. L'évolution de la température à l'intérieur de la goutte doit alors être prise en compte pour modéliser correctement les transferts thermiques à la surface de la goutte. De plus, lorsque le gaz environnant n'est pas au repos, le cisaillement à la surface de la goutte entraîne des mouvements de circulation, qui modifient la structure thermique interne de la goutte, et donc les échanges à sa surface.

Les améliorations du modèle de Spalding sont détaillés par Sazhin [177] et classés ci dessous par ordre de complexité croissante :

- Modèles avec conductivité thermique du liquide finie : un profil de température s'établit à l'intérieur de la goutte, nécessitant de résoudre les équations thermiques $1D$ à l'intérieur de la goutte.
- Modèles avec prise en compte des mouvements de circulation interne : l'influence de ces mouvements est introduite soit par l'introduction d'une conductivité thermique liquide finie corrigée, soit en présupposant la forme des mouvements internes ("vortex model" [14] ou "Hill vortex" [177]).
- Modèles faisant appel à la résolution des équations de Navier-Stokes 2D ou 3D à l'intérieur de la goutte.

Le modèle "parabolic temperature profile" proposé par Dombrovsky et Sazhin [59, 177], qui correspond à un modèle à conductivité thermique finie, permet notamment d'améliorer significativement les résultats par rapport au modèle de Spalding, tout en limitant le surcoût associé à la prise en compte de la non-uniformité de la goutte. D'autres modèles sont disponibles dans la littérature mais ne sont pas détaillés ici [177, 188].

4.2.2.2.3 Effets hors-équilibre

Dans le modèle de Spalding, le taux d'évaporation est fortement lié à la quantité de vapeur de carburant à la surface de la goutte, obtenue à partir d'une hypothèse d'équilibre de l'interface liquide/gaz. Lorsque le taux d'évaporation est grand ou lorsque la température à la surface de la goutte varie brutalement, les effets hors-équilibre ne peuvent plus être négligés. Le modèle de Spalding peut être adapté en introduisant, par exemple, une loi d'évaporation de Langmuir-Knudsen [17], en modifiant la fraction molaire à la surface :

$$X_{F,\zeta}^{\text{hors eq.}} = X_{F,\zeta}^{\text{eq.}} - \left(\frac{L_K}{d_p/2}\right)\beta \tag{4.49}$$

où $X_{F,\zeta}^{\text{eq.}}$ la fraction molaire à l'équilibre (Eq. (4.24)) et L_K est l'épaisseur de la couche de Knudsen [3]. Miller *et al.* [146] montrent avec ce modèle que les effets hors-équilibre peuvent être particulièrement importants pour les gouttes de diamètre initial inférieur à 50 μm. D'autres modèles hors-équilibre sont disponibles dans la littérature, mais ne sont pas détaillés ici [212, 10, 29].

4.2.2.2.4 Prise en compte du rayonnement

Dans la chambre de combustion, les températures très élevées liées à la présence d'une flamme entraînent un rayonnement intense. L'injection directe de carburant met le spray en présence de ce rayonnement et a tendance à augmenter le taux d'évaporation des gouttes [177]. Abramzon et Sazhin [1] propose une adaptation du modèle de Spalding en prenant en compte de manière approchée le rayonnement absorbé par la goutte et montre que l'influence du rayonnement est particulièrement importante pour les carburants Diesel en augmentantf significativement le taux d'évaporation par rapport au modèle de Spalding.

3. épaisseur à la surface de la goutte, où la phase (liquide ou gazeuse) est indéterminée

4.2.2.2.5 Relâchement des hypothèses sur le mélange

Dans les équations (4.22b) et (4.22c), les valeurs λ/C_P et $\rho\mathcal{D}_F$ sont supposées constantes selon la composante radiale. Le modèle de Spalding est sensible à leurs valeurs, il est donc nécessaire de choisir judicieusement les conditions thermodynamiques dans lesquelles elles sont évaluées. Les conditions sont généralement choisies à une position donnée entre la surface de la goutte et le champ lointain, en introduisant un paramètre d'interpolation a [146] :

$$T_R = T_\zeta + a(T_\infty - T_\zeta) \tag{4.50}$$

$$Y_{k,R} = Y_{k,\zeta} + a(Y_{k,\infty} - Y_{k,\zeta}) \tag{4.51}$$

Miller *et al.* [146] montrent que $a = 1/3$ permet d'obtenir le meilleur accord avec l'expérience : c'est la loi du $1/3 - 2/3$.

Les facteurs λ/C_P et $\rho\mathcal{D}_F$ s'expriment en fonction de la viscosité du gaz μ_g et respectivement du nombre de Schmidt [4] du carburant gazeux $\mathcal{S}_c^F$, et du nombre de Prandtl [5] $\mathcal{P}_r$:

$$\rho\mathcal{D}_F = \frac{\mu(T_{ref})}{\mathcal{S}_c^F} \tag{4.52}$$

$$\frac{\lambda}{C_P} = \frac{\mu(T_{ref})}{\mathcal{P}_r} \tag{4.53}$$

Ces expressions permettent de déterminer le nombre de Lewis $\mathcal{L}e_F = \mathcal{S}_c^F/\mathcal{P}_r$.

D'autres méthodes font appel à des corrections de complexité accrues. Sirignano dérive à nouveau le système d'équations en veillant à différencier diffusion thermique et massique en introduisant le nombre de Lewis [189]. Urzay *et al.* [210] maintiennent une conductivité thermique C_P dépendant de la température en résolvant l'équation sur l'enthalpie de la goutte, et non sur la température. Tonini *et al.* [203] prennent en compte la variation radiale de masse volumique avec la température et le mélange, ce qui leur permet d'obtenir de meilleurs résultats lorsque la température environnante est très élevée. De Oliveira *et al.* [56] introduisent une variation des coefficients de transport avec la température pour améliorer la prédiction du modèle.

Récemment, Sierra *et al.* [89] proposent une détermination plus judicieuse des nombres de Prandtl et Schmidt qui prend en compte les effets de transport complexe. Ils introduisent aussi le calcul d'une viscosité gazeuse prenant en compte le mélange (Approximation de Wilke [219]). Cette méthodologie permet de se rapprocher des valeurs expérimentales, en incorporant au modèle classique, des éléments physiques réalistes, sans surcoût de calcul.

4.2.2.2.6 Caractère multi-composant du carburant

Les carburants aéronautiques sont un assemblage de très nombreuses chaines carbonées et aromatiques, chaque composant ayant une évaporation différentielle par rapport à un autre. Afin de

4. rapport entre le temps de diffusion visqueuse et de diffusion de masse
5. rapport entre le temps de diffusion visqueuse et de diffusion thermique

permettre une modélisation fidèle du caractère multi-composants du carburant, deux voies complémentaires sont explorées :

- Réduction du nombre de composés représentatifs : on recherche l'assemblage de quelques chaines carbonées élémentaires (n-heptane, iso-octane, dodecane ...) qui représente le plus fidèlement certaines caractéristiques du carburant initial, telles que le délai d'auto-allumage, la viscosité, les pressions et température de vapeur saturante, la masse volumique etc. Ce mélange de quelques espèces seulement, appelé "*surrogate*" (substitut), permet de grandement simplifier leur étude expérimentale [127, 147, 80] et numérique.
- Dérivation de modèles d'évaporation multi-espèces, permettant de prendre en compte l'évaporation différentielle [178, 64].

L'introduction du caractère multi-composants du carburant introduit logiquement un temps de calcul supplémentaire, et nécessite, dans le cas de la simulation d'un spray réactif, d'utiliser une cinétique chimique capable de faire réagir l'ensemble des composants évaporés.

4.2.2.2.7 Prise en compte de l'interaction entre gouttes voisines dans un spray modérément dilué

Le modèle de Spalding fait l'hypothèse que la goutte est isolée car le spray est dilué. Or, il existe des zones dans une chambre de combustion où le spray n'est que modérément dilué, notamment proche de l'injection. Afin de prendre en compte l'interaction entre gouttes voisines dans le cadre du modèle macroscopique d'évaporation, Chiu et Su [47, 43] propose de s'appuyer sur une vision moléculaire du spray, afin d'évaluer la probabilité pour une goutte donnée de trouver une goutte voisine à une certaine distance, et de corriger le taux d'évaporation de la goutte isolée notamment en fonction d'une évaluation de la densité locale du spray. Cette approche permet d'envisager une prise en compte de l'influence de l'interaction goutte à goutte qui soit abordable dans une LES-DPS, pour traiter les spray modérément dilués.

4.3 Fonctionnement d'AVBP et modèles utilisés dans la suite

Le code LES AVBP permet la résolution des équations compressibles de Navier-Stokes, présentées en Sect. 3.4, sur des maillages hybrides non-structurés. Le solveur s'appuie sur une discrétisation "cell-vertex" : les variables sont stockées aux noeuds du maillage tandis que les équations de conservation sont intégrées dans les éléments. AVBP est conçu pour être utilisé sur des architectures de calculateurs massivement parallèles, grâce à la librairie MPI (pour 'Message Passing Interface'). Suivant le nombre de processeurs alloués à la simulation, le maillage est partitionné en début de calcul, en autant de domaines de taille équivalente que de nombre de processeurs, afin de répartir la charge de travail. Les conditions aux limites sont traitées selon un formalisme de conditions aux limites caractéristiques ("NSCBC" [161]). Dans ce travail, la discrétisation spatio-temporelle des flux convectifs du système d'équation fait appel à deux schémas numériques implémentés dans AVBP : le schéma de Lax-Wendroff (LW), qui consiste en un schéma explicite du deuxième en ordre

en temps et en espace, et le schéma de Taylor-Galerkin TTGC [50], qui est un schéma explicite d'ordre trois en espace et en temps. La discrétisation spatiale des flux diffusifs est assurée par un schéma élément-fini d'ordre 2 s'appuyant sur la discrétisation cell-vertex [33]. Un opérateur de viscosité artificielle développé par Colin *et al.* [33] permet d'assurer la stabilité du schéma numérique explicite.

La phase liquide est simulée avec AVBP en résolvant les équations lagrangiennes déterministes, qui sont intégrées avec un schéma temporel explicite du premier ordre. La force de traînée (Eq. 4.14) prend en compte la corrélation de Schiller et Naumann [179]. Le modèle d'évaporation d'Abramzon & Sirignano [2] est utilisé pour tous les cas purement évaporants, avec également l'utilisation d'une méthodologie spécifique permettant de mieux évaluer les grandeurs thermodynamiques et les propriétés de transport autour de la goutte [89] (cf. Sect. 4.2.2.2.5). L'interaction du spray avec les parois est approchée par des rebonds élastiques ou par une condition de glissement à la paroi. Diverses méthodes d'injections permettent d'introduire le spray dans la simulation, avec différentes géométries de spray et de distributions en taille de gouttes à l'injection.

Troisième partie

Développement et optimisation de fonctionnalités dans le solveur lagrangien d'AVBP

Chapitre 5

Modification du principe de localisation et de transport des particules, injection.

Sommaire

5.1 Modification du principe de localisation et de transport des particules 100
5.1.1 Pourquoi un nouvel algorithme ? 100
5.1.2 Algorithme de localisation d'Haselbacher et al. 102
5.1.3 Adaptation de l'algorithme d'Haselbacher et al. aux maillages partitionnés selon un mode à mémoire non partagée. 103
5.1.4 Traitement des conditions aux limites de périodicité 107
5.2 Méthode d'injection d'un spray selon une distribution discrète quelconque . .108
5.2.1 Contexte de développement 108
5.2.2 Principe de fonctionnement 110
5.2.3 Validation sur une distribution réelle 110

Les applications récentes du solveur lagrangien d'AVBP à des configurations réelles géométriquement très complexes [103, 38, 88], avec parois multi-perforées, coudes, coins, surfaces courbes et axi-périodicité, ont mis en défaut, dans certaines zones, l'algorithme de localisation et de transport des particules initialement développé par Garcia [76], en faisant notamment apparaître une perte de masse liquide à travers les parois. Dans ce chapitre, un nouvel algorithme de localisation est présenté en première partie. Son adaptation au code AVBP est également détaillée, impliquant un environnement de calcul massivement parallèle et traitant les conditions aux limites axi-périodiques pour le solveur lagrangien.

La simulation de configurations réelles nécessite également que le code soit capable de traiter des systèmes d'injection complexes, produisant des populations de gouttes très variées. De manière récurrente au cours des précédents travaux et de cette thèse, il a été mis en évidence que la détermination de la distribution en taille de gouttes injectées dans la simulation ne faisait pas l'objet d'une méthodologie facile à mettre en oeuvre, et pouvait introduire une erreur non négligeable

par rapport à la distribution en taille du cas réel. Afin de simplifier et d'améliorer la méthode de détermination de la distribution en taille à l'injection, une nouvelle fonctionnalité d'AVBP qui permet d'injecter une distribution discrète quelconque, a été implantée et est présentée dans la deuxième partie de ce chapitre.

5.1 Modification du principe de localisation et de transport des particules

5.1.1 Pourquoi un nouvel algorithme ?

C'est en réalisant des LES-DPS dans une chambre de combustion réelle, qui présente un grand nombre de surfaces courbes en aval de la zone d'injection, qu'une perte importante de masse liquide est apparue, mise en évidence par des bilans de masse liquide (Fig. 5.1). Plus de 20% de la masse injectée était perdue numériquement dans la simulation de la phase de remplissage de la chambre avant allumage. Il a été diagnostiqué que l'algorithme de localisation des particules était à l'origine du problème, notamment en zone proche paroi.

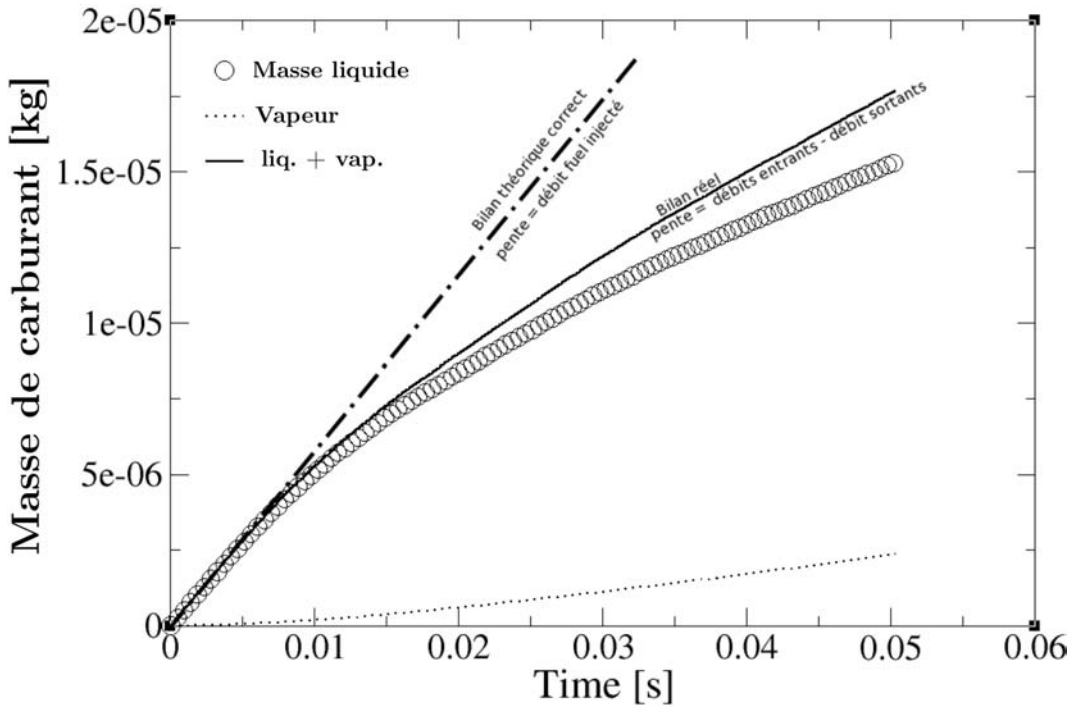

Figure 5.1 : *Bilan de masse liquide pour une LES-DPS non réactive correspondant au remplissage initial d'une chambre de combustion réelle avant allumage. Une perte de masse de carburant liquide à travers les surfaces parois concaves de la géométrie est mise en évidence, par rapport au comportement attendu (croissance linéaire de la masse de carburant à l'intérieur de la chambre).*

L'algorithme de localisation des particules a pour objectif de fournir à chaque particule, l'information de la cellule de maillage qui la contient. Cette information est nécessaire pour le couplage entre phase liquide et gazeuse : on a besoin de connaitre les conditions locales gazeuses à la position de la goutte pour calculer les termes sources pour la phase gazeuse (trainée et évaporation). Du fait du mouvement des particules dans le domaine, cette information doit être mise à jour à chaque itération de calcul, notamment lorsque la particule change de cellule. Le fonctionnement de l'algorithme de localisation des particules initialement développé, détaillé dans [76] et illustré par le schéma 5.2, se résume aux étapes suivantes à chaque itération :

1. Déplacement de la particule à sa nouvelle position, d'une distance $\vec{u}_p \Delta t$, où $\vec{u}_p$ est la vitesse de la goutte et Δt le pas de temps lagrangien d'intégration.
2. Recherche de la particule dans la cellule de départ
3. Si elle n'y est pas, recherche dans la couche de cellules voisines. L'algorithme fait donc l'hypothèse que la distance parcourue par une goutte en une itération lagrangienne est suffisamment petit pour ne pas aller au delà de cette couche, ce qui est le cas dans la plupart des cas (pas de temps lagrangien généralement très petit).

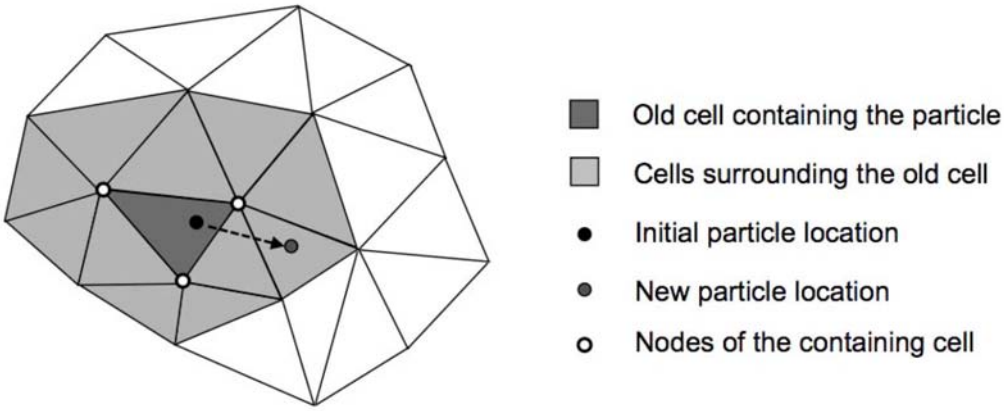

Figure 5.2 : *Schéma illustrant le fonctionnement de l'ancien algorithme de localisation (adapté de [76]).*

Lorsqu'une goutte atteint une cellule en contact avec une paroi, un comportement particulier lui est imposé (glissement, rebond, film). Afin de savoir si la goutte traverse la face de paroi dans cette cellule de bord, sa trajectoire est comparée à la donnée d'un plan matérialisant la paroi potentiellement concave (Fig. 5.3). La donnée du plan est propre à la cellule de bord dans laquelle se fait l'évaluation de l'intersection (cellule qui contient la goutte au début de l'itération), et ne prend pas en compte l'information des cellules de bord voisines. Lorsque la particule glisse sur une paroi concave, elle peut être déplacée au cours de sa trajectoire en dehors du maillage, sans que sa trajectoire n'ait pu être corrigée, comme illustré en Fig. 5.3. Dans la situation décrite, la donnée du plan de la cellule de départ n'est pas suffisante pour rendre compte de la concavité introduite par les cellules de bord suivantes. La trajectoire n'étant pas modifiée, la particule est alors transportée

à l'extérieur du maillage. N'étant pas retrouvée par l'algorithme de localisation des particules, elle est alors considérée comme "perdue". D'autres situations plus complexes conduisant à la perte de particules ont été mises en évidence, notamment dans les coins, mais ne sont pas détaillées ici. Les pertes de particules sont d'autant plus fréquentes que le nombre de particules dans la chambre est grand, ce qui est le cas lors des phase de remplissage de la chambre avant simulation d'une séquence d'allumage, par exemple.

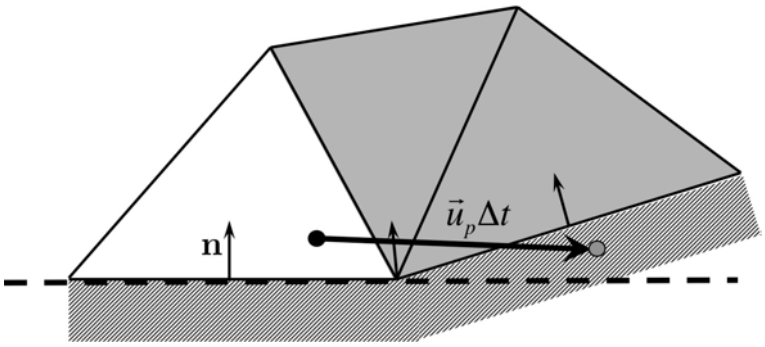

Figure 5.3 : *Schéma illustrant l'un des mécanismes de perte de masse liquide de l'algorithme de localisation des particules précédemment utilisé et détaillé dans [76].*

Ce diagnostic dans les géométries complexes a conduit à l'implantation dans AVBP de l'algorithme de localisation des particules récemment proposé par Haselbacher *et al.* [91]. Cet algorithme a plusieurs avantages : plus de pertes dans les situations précédemment décrites, une robustesse accrue pour le suivi de la trajectoire des particules, et un gain potentiel en temps de calcul. Dans [91], Haselbacher *et al.* n'évoquent que brièvement l'application de cet algorithme dans un environnement massivement parallèle. Dans la suite, l'algorithme de localisation des particules d'Haselbacher *et al.* est brièvement expliqué, avant de détailler son adaptation au parallélisme, aux maillages hybrides [1] et aux conditions aux limites.

5.1.2 Algorithme de localisation d'Haselbacher et al.

5.1.2.1 Notion de connectivité aux faces

L'algorithme repose entièrement sur un tableau de connectivité du maillage non structuré, liant une cellule à ses voisines au travers de ses faces. Lorsqu'une particule se déplace d'une cellule A à une cellule B, le tableau permet de connaître immédiatement le numéro de la cellule B, connaissant la cellule A et la face de cette cellule qui est traversée par la particule. Lorsque la face traversée correspond à une condition aux limites, ou à une interface entre deux partitions, un traitement spécifique peut alors être appliqué selon le type de condition limite. Ce tableau de connectivité est construit au début du calcul et est ensuite utilisé au cours du calcul par l'algorithme de localisation d'Haselbacher *et al.*.

1. Plusieurs types de cellule dans le même maillage (tétraèdre, hexaèdre, prisme ...)

5.1.2.2 Description de l'algorithme

L'algorithme assure le déplacement et la localisation de chaque particule, ainsi que le traitement d'éventuelles conditions aux limites. A chaque itération, chaque particule k a une distance spécifique à parcourir $\Delta L^k = \|\mathbf{u}_p^k\|\Delta t$. Le long de cette trajectoire, l'algorithme *Intersect* décrit dans la Fig. 5.4 vérifie si une face est traversée. Si c'est le cas, le tableau de connectivité permet d'obtenir la nouvelle cellule occupée par la particule. Cette opération est effectuée autant de fois que nécessaire jusqu'à ce que la distance ΔL^k ait été parcourue par la particule k, grâce au programme *trackpath* décrit en Fig. 5.6. En Fig. 5.5, la situation d'une particule ayant traversé deux faces est illustrée, correspondant à deux passage dans l'algorithme *Intersect*. Lorsqu'une face appartient à une condition limite, un traitement particulier peut être appliqué au vecteur trajectoire $\mathbf{t}^k$, ainsi qu'à la distance à parcourir ΔL^k. Par exemple, pour le cas classique du rebond à la paroi, schématisé en Fig. 5.7, la particule est déplacée jusqu'à la face de paroi, puis son vecteur trajectoire $\mathbf{t}^k$ est remplacé par son symétrique à la face, $\mathbf{t'}^k$. La particule poursuit ensuite pour atteindre la distance ΔL^k sur l'itération, avec d'éventuels changements supplémentaires de cellules. Dans l'algorithme d'Haselbacher *et al.*, la particule est donc déplacée progressivement, en veillant à traiter la trajectoire et la position cellule après cellule, à l'inverse de l'ancien algorithme, qui déplace la particule de ΔL^k en une fois, et ne la recherche que dans l'état final, et pour une seule couche de cellules voisines. L'algorithme d'Haselbacher *et al.* ne limite donc pas le déplacement des particules aux cellules voisines, et résoud le problème de perte de particule au paroi. En effet, comme illustré en Fig. 5.7 pour un des cas pathologiques précédents, l'information de la troisième face traversée, qui correspond à un mur, est directement disponible, permettant d'effectuer un rebond de la particule et maintenir la particule à l'intérieur du maillage, là où l'ancien algorithme ne le faisait pas et perdait cette particule.

L'algorithme est applicable à tout type de maillage (avec notamment le traitement des faces non-coplanaires [2]). Les conditions aux limites de paroi glissante, de rebond, de film liquide [37] peuvent être correctement traitées. De plus, de nouvelles conditions aux limites peuvent être facilement implémentées sans difficulté inhérente à la localisation des particules. D'autre part, avec cet algorithme ne se pose plus le problème de perte de particule traversant plusieurs cellules ou au parois, du fait du traitement progressif de chaque particule le long de la trajectoire, assurant que la particule est localisée quelle que soit la distance qu'elle doit parcourir dans l'itération.

5.1.3 Adaptation de l'algorithme d'Haselbacher et al. aux maillages partitionnés selon un mode à mémoire non partagée.

La parallélisme du code a un impact fort sur la conception d'un algorithme et impose d'être pris en compte au premier stade d'implantation de l'algorithme. En effet, lorsqu'on utilise des méthodes de décomposition de domaine, chaque processeur contient dans sa mémoire propre,

2. Du fait de l'erreur numérique intrinsèque au calcul, une face à quatre sommets ne peut définir rigoureusement un plan

Entrées : trajectoire (normée) $\mathbf{t}$, position initiale $\mathbf{x}_p^n$, cellule initiale n_c
Sorties : distance L_{min} et face $n_{f,min}$ de la première face intersectée

```
1   Programme INTERSECT( t, x_p^n, n_c, L_min, n_f,min)
2     L_min = ∞                          >> Initialisation (recherche d'un minimum)
3     Pour chaque face n_f ∈ F(n_c)      >> Boucle sur toutes les faces de la cellule n_c
4         n_f = n(n_f)                    >> Récupération de la normale de la face
5         x_c = x_c(n_f)                  >> Récupération du centre de la face
6         Si (x_c − x_p).n ≥ −ε alors     >> Test de contenance (algorithme robuste)
7           Si t.n > 0 alors
8               L_I = max{(x_c−x_p).n / t.n, 0}     >> Calcul de la distance à la face
9               Si L_I < L_min alors
10                L_min = L_I
11                n_f,min = n_f
12              Fin si
13          Fin si
14        Sinon                  >> Particule à l'extérieur de la cellule
15          L_min = 0
16          n_f,min = n_f
17          Sortie
18        Fin si
19    Fin boucle
20    x_p ← x_p + L_min t          >> Mise à jour de la position de la particule
21  Fin Programme
```

Figure 5.4 : *Algorithme intersect permettant de calculer l'intersection d'une trajectoire de particule avec une face de cellule.*

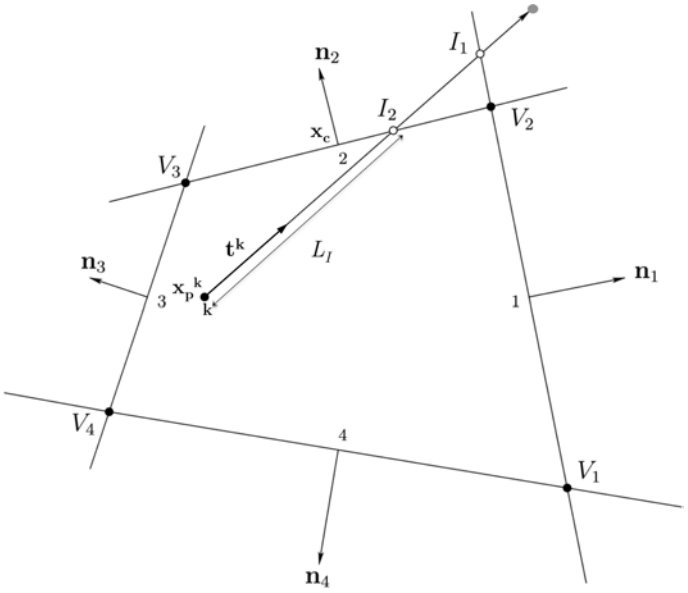

Figure 5.5 : *Illustration du traitement appliqué à une particule traversant deux faces de cellules au cours d'une itération.*

Entrées : Tableau de particules Z_i (avec $\mathbf{x}_p^n$, u_p^n, n_c^n), Δt
Sorties : Tableau de particules internes traitées Z_f (notamment avec l'info. de n_c^{n+1}), tableau de particules sorties Z_{envoi} à envoyer

```
1  Programme TRACKPATH(Z_i, Δt, Z_f, Z_envoi)
2     Pour toute particule p ∈ Z_i
3       d = u_p^n Δt
4       t = u_p^n Δt/d
5       x_p = x_p^n
6       n_c = n_c^n
7       Boucle
8         INTERSECT( t, x_p, n_c, L_min, n_f,min)
9         d ← d − L_min
0         Si d ≥ 0 alors >> Intersection de la particule avec la face n_f,min
1           Si n_f^min ∈ [Faces internes]
2              Nouvelle cellule n_c^{n+1} = cellule adjacente à n_c par n_f,min
3           Sinon                          >> Traitement des conditions aux limites
4                Si n_f^min ∈ [Faces d'interface entre partitions] alors
5                   Récupération de la nouvelle cellule dans la future partition
6                   Stockage de cette particule dans Z_envoi (avant envoi collectif)
7                Ou si n_f^min ∈ [Parois] alors
8                   REBOND(t,n_f,min,x_p)
9                Ou si ...                      >> Autres conditions aux limites
0                Fin si
1           Fin si
2         Sinon                    >> Pas d'intersection : même cellule
3              n_c^{n+1} = n_c
4              particule suivante
5         Fin si
6       Fin Boucle
7     Fin Boucle sur les particules
8  Fin Programme
```

Figure 5.6 : *Algorithme trackpath assurant le traitement progressif de l'avancement des particules dans le maillage.*

une partie du maillage, appelée partition, ainsi que toutes les données des particules contenues dans cette partition. De ce fait, toute particule transitant d'une partition à une autre, doit être transmise au travers d'une communication inter-processeurs. Or, ces communications, souvent bloquantes, peuvent être coûteuses et nécessitent une synchronisation entre receveur et envoyeur. Afin d'optimiser les communications inter-processeurs, une des méthodes consiste à regrouper le plus de données possible avant d'effectuer un seul envoi global plus gros. Dans notre cas, toutes les particules traversant une partition au cours d'une itération sont stockées au niveau de l'appel du programme *trackpath* (Fig. 5.6), et sont transmises à la nouvelle partition via un envoi/réception collectif. L'algorithme de localisation doit être appliqué à nouveau après réception dans la nouvelle partition, pour finir le traitement des particules entrantes dans la partition, n'ayant pas fini de parcourir leur distance ΔL^k. Dans l'idéal, cette opération doit être effectuée tant que toutes les

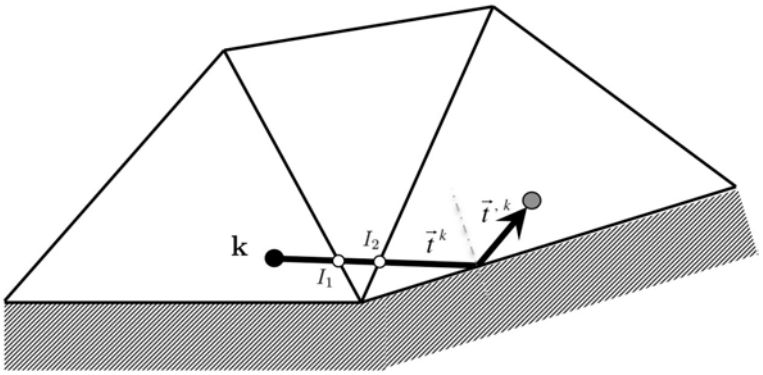

Figure 5.7 : *Illustration du fonctionnement d'un rebond sur une paroi. Résolution du problème de perte de masse associé à ce cas particulier, grâce au nouvel algorithme de localisation.*

particules n'ont pas terminé leur déplacement, puisqu'une particule peut être amenée à traverser plusieurs partitions au cours de la même itération. Cette opération est réalisée en parallèle avec le programme *newloc* (Fig. 5.8). Tous les processeurs sont concernés, même s'ils ne contiennent pas de particules au début de l'itération, puisqu'ils doivent rester en attente d'éventuelles particules entrantes.

Entrées : Tableau de particules Z_{init} (avec $\mathbf{x}_p^n$, u_p^n, n_c^n), Δt, n_{boucle}
Sorties : Tableau de particules traitées Z_{fin} (notamment avec l'info de n_c^{n+1})

```
1   Programme NEWLOC(Z_init,Δt,n_boucle,Z_fin)
2     Z_Fin = [ ]          >> Initialisation du tableau des particules traitées
3     Z ← Z_init
4     Boucle sur n_boucle, ou boucle infinie si n_boucle = 0          >> Choix de l'utilisateur
5       TRACKPATH(Z, Δt, Z_f, Z_envoi)
6       Z_fin ← Z_fin + Z_f
7       Si n_boucle = 0 alors                  >> boucle jusqu'à traitement totale des particules
8           n_p,envoi = taille de Z_envoi
9            REDUCTION(n_p,envoi,n^totale_p,envoi)        >> Somme totale des particules à envoyer
10           Si n^total_p,envoi = 0 alors                  >> Toutes les particules ont été traitées
11               Sortie de programme
12           Fin si
13        Fin si
14        ENVOI de Z_envoi aux partitions voisines concernées
15        RECEPTION des particules entrantes, stockées dans Z_recep.
16        Z ← Z_recep.
17      Fin Boucle
18    Fin Programme
```

Figure 5.8 : *Algorithme newloc assurant une gestion optimale de la localisation des particules dans un maillage partitionné.*

Lorsqu'une particule quitte une partition au cours de l'itération, la partition initiale doit nécessairement communiquer à l'ensemble des partitions, à la fin du programme de localisation locale *trackpath*, qu'il reste des particules à traiter. Cette communication globale, faite à l'aide d'une ré-

duction globale sur le nombre de particules à envoyer (via un appel à la fonction *MPI-all-reduce*), constitue une rupture dans la boucle de traitement successif des particules. En général, il faut deux à trois appels successifs de l'algorithme de base pour achever le traitement, puisque seulement une petite partie des particules change de partition, et un partie encore plus faible traverse deux partitions au cours de la même itération. A chaque nouvelle traversée, une communication globale de réduction doit être faite pour maintenir tous les processeurs en attente de réception, ce qui est source de ralentissement du calcul. Dans certains cas, le nombre de partitions traversées peut être supérieur à deux, pour une nombre très faible de particules, et constitue un blocage non acceptable au vu des contraintes CPU.

La quasi-totalité des particules étant traitée complètement en deux appels de localisation, un compromis est proposé en limitant le nombre d'appels successifs de l'algorithme à deux, avec un envoi entre voisins entre deux appels de *trackpath*, et en ne faisant pas appel à la communication globale de réduction. Afin de rendre cette fonctionnalité la plus générique possible, le paramètre n_{boucle} est introduit et correspond au nombre de boucles à effectuer sans réduction. Il est égal à 2 par défaut. L'utilisateur peut choisir de le mettre à 0 pour faire appel au fonctionnement classique avec réduction globale et nombre de boucles suffisantes pour traiter toutes les particules. Il peut aussi décider d'augmenter le nombre de boucles, si le cas étudié le rend nécessaire. Dans le cas $n_{boucle} = 2$, la limitation revient à considérer qu'à chaque itération, l'algorithme sera appelé deux fois quelle que soit la situation, même si aucune goutte ne change de partition à l'itération en question (ce qui est fort peu probable). Les particules devant changer deux fois de partition dans l'itération sont bloquées à la sortie de la deuxième partition traversée, comme illustré en Fig. 5.9. Grace à cette méthode, le blocage lié à la communication globale de réduction est supprimé. A l'heure actuelle, aucun impact sur le résultat n'est à noter avec la méthode optimale, puisque le nombre de particules traversant deux partitions est extrêmement faible.

5.1.4 Traitement des conditions aux limites de périodicité

Le développement de ce nouvel algorithme a été l'occasion de réfléchir à un traitement générique des conditions aux limites de périodicité pour la phase lagrangienne. Pour la phase gazeuse, le traitement d'une périodicité est intrinsèque à la connectivité du maillage car elle est construite en amont du calcul par l'outil de maillage : deux noeuds liés par une périodicité sont considérés comme égaux dans le calcul, donc liés par une condition particulière dans le tableau global de connectivité. Les particules traversant une interface de périodicité doivent être déplacées et leur trajectoire modifiée en conséquence. Deux types de périodicité sont disponibles dans le code AVBP : la périodicité en translation, entre deux faces parallèles éloignées d'une translation, et la périodicité en rotation, entre deux faces liées par une rotation autour d'un axe. Afin de traiter de manière générique la périodicité de la phase lagrangienne, on peut résumer la définition d'une périodicité par l'union d'une translation et d'une rotation liant deux faces de cellules de maillage. Comme illustré en Fig. 5.10, il est possible de définir une base locale liée à chaque face périodique,

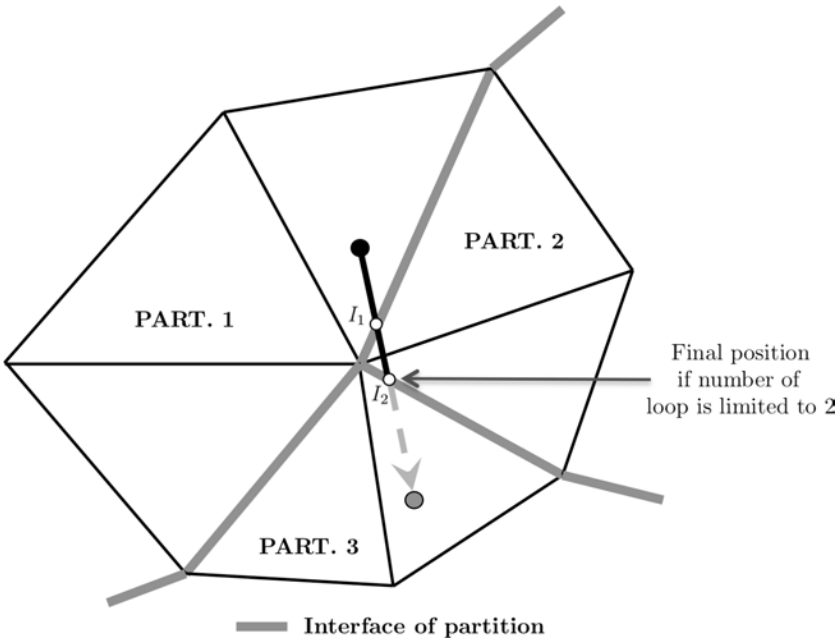

Figure 5.9 : *Fonctionnement de l'algorithme optimisé, dans le cas d'une particule devant traverser plusieurs partitions dans l'itération courante.*

ainsi qu'une matrice de transformation entre les bases de deux faces périodiques. En construisant ces deux informations une fois en début de calcul, il est possible d'appliquer localement le traitement périodique à une particule traversant une face de la périodicité. Pour ce faire, il suffit de transposer la position de la particule dans la base locale à la face traversée, puis d'appliquer la matrice de transformation de la périodicité, puis transposer la nouvelle position, de la base locale de la face d'arrivée vers la base globale. La particule est ainsi déplacée et orientée de manière locale à un couple de faces périodiques, sans nécessité de prendre en compte la structure globale de la périodicité. Ainsi, d'autres formes de périodicité, liant rotation et translation, sont donc envisageables, dès lors que leur connectivité est construite en début de calcul, par la construction des bases locales, liées deux à deux par une matrice de transformation périodique. Aucune information supplémentaire n'est à fournir pour activer une périodicité de la phase lagrangienne, puisque cette dernière est reconstruite entièrement à partir de la périodicité du maillage.

5.2 Méthode d'injection d'un spray selon une distribution discrète quelconque

5.2.1 Contexte de développement

Les méthodes de résolution lagrangienne ont, contrairement aux méthodes eulériennes diphasiques, le grand avantage de traiter de manière immédiate et sans surcoût, une polydispersion du

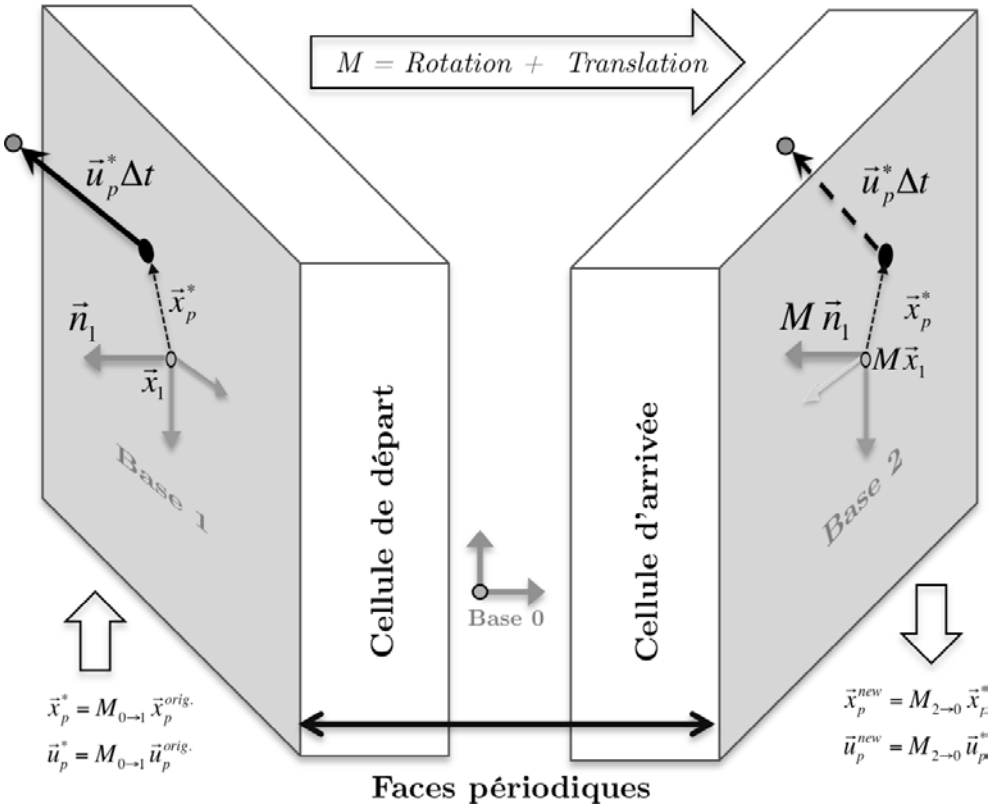

Figure 5.10 : *Traitement générique d'une périodicité pour la phase lagrangienne, à l'aide de l'algorithme de localisation d'Haselbacher et al..*

spray en termes de diamètre. Le spray numériquement injecté, représente un spray physique issu d'un système d'injection réel. Ce spray physique suit une distribution en diamètre, que l'on cherche à reproduire dans la simulation. La distribution physique est généralement obtenue à partir de mesures de populations de gouttes en aval de l'injecteur, où le spray est suffisamment peu dense pour permettre une mesure optique. Pour reproduire cette distribution physique dans le calcul, certaines fonctions de distribution sont particulièrement bien adaptées pour la plupart des systèmes d'injections usuels [125]. Quatre types de distribution sont disponibles dans AVBP : distribution de Rosin-Ramler, distribution de Nukiyama-Tanasawa, distribution log-normale et distribution log-normale bimodale. Pour les définir, un petit nombre de paramètres est nécessaire et suffisant, généralement le diamètre moyen et une variable d'étalement. Malheureusement, ces distributions usuelles ne permettent pas toujours de décrire avec précision les distributions expérimentales. De ce fait, pouvoir injecter une distribution discrète quelconque est une fonctionnalité particulièrement intéressante pour la simulation précise d'un spray réel.

5.2.2 Principe de fonctionnement

La distribution en taille de l'injection est généralement assurée numériquement par le tirage d'un nombre aléatoire, de probabilité **uniforme** entre 0 et 1. Il s'agit ici de montrer comment tirer parti de cette fonctionnalité pour générer une distribution quelconque, non uniforme.

Soit une distribution discrète de taille de goutte $\mathfrak{D}_{\mathrm{PDF}}$, exprimée en nombre ou en volume. En construisant la fonction densité de probabilité cumulative ("PDF cumulative") normée $\mathfrak{C}_{\mathrm{PDF}}$ construite sur $\mathfrak{D}_{\mathrm{PDF}}$, il est possible de ramener le problème statistique initialement non uniforme à un problème uniforme. La PDF cumulative est par définition :

$$\mathfrak{C}_{\mathrm{PDF}}(D) = \frac{\int_0^d \mathfrak{D}(d')\mathrm{d}d'}{\int_0^\infty \mathfrak{D}(d')\mathrm{d}d'} \tag{5.1}$$

$\mathfrak{C}_{\mathrm{PDF}}$ est par définition monotone, croissante, et varie de 0 à 1 entre la borne inférieure et supérieure de d. Si on tire un nombre aléatoire η uniformément entre 0 et 1, on peut rechercher la valeur d_η associée à sa valeur dans la PDF cumulative, tel que $\mathfrak{C}_{\mathrm{PDF}}(d_\eta) = \eta$, tel qu'illustré en Fig. 5.11 à droite. Si on réitère cette opération un grand nombre de fois, on obtient une population de gouttes de diamètre différent. Cette population a la particularité de suivre exactement la distribution discrète $\mathfrak{D}_{\mathrm{PDF}}$. En effet, une valeur de diamètre d a d'autant plus de chance d'être tirée que sa probabilité $\mathfrak{D}_{\mathrm{PDF}}(d)$ est grande, car la projection de $\mathfrak{C}_{\mathrm{PDF}}$ sur l'axe des ordonnées (sur lequel on tire uniformément) est d'autant plus importante que $\mathfrak{D}_{\mathrm{PDF}}(d)$ est grande, comme illustrée pour deux diamètres d_1 et d_2 (avec d_1 plus probable que d_2) en Fig. 5.11.

La distribution fournie par l'utilisateur en entrée du calcul est introduite sous forme tabulée $(d_i, \mathfrak{D}_{\mathrm{PDF}}(d_i))$, telle qu'elle est généralement mesurée. $\mathfrak{C}_{\mathrm{PDF}}$ est construite en début de calcul à partir du couple $(d_i, \mathfrak{D}_{\mathrm{PDF}}(d_i))$. Une méthode de Newton permet d'obtenir l'inversion de $\mathfrak{C}_{\mathrm{PDF}}$, afin d'obtenir le diamètre d_η tel que $\mathfrak{C}_{\mathrm{PDF}}(d_\eta) = \eta$.

5.2.3 Validation sur une distribution réelle

L'algorithme de tirage aléatoire est testé sur un spray polydisperse issu d'une expérience de flamme contre-courant étudiée par Mikami et al. [143] et détaillée en Sect. 9.3. La distribution en diamètre mesurée en entrée de la zone d'intérêt n'est pas reproductible par les distributions usuelles, du fait de son fort étalement vers les plus grosse gouttes (Fig. 5.12). La distribution est bien reproduite numériquement. La distribution expérimentale a été tabulée en 50 classes de diamètres, ce qui explique les légers désaccords sur la distribution numérique. Une table plus grande conduirait à une meilleure prédiction, avait été introduite, la précision aurait été meilleure, au prix d'un temps de calcul plus grand du fait de la méthode de Newton permettant d'inverser la PDF cumulative. Au vu des incertitudes sur les mesures de distributions expérimentales, l'accord obtenu est tout à fait satisfaisant.

Cette fonctionnalité sera utilisée dans le calcul de la configuration de la partie 9.3.

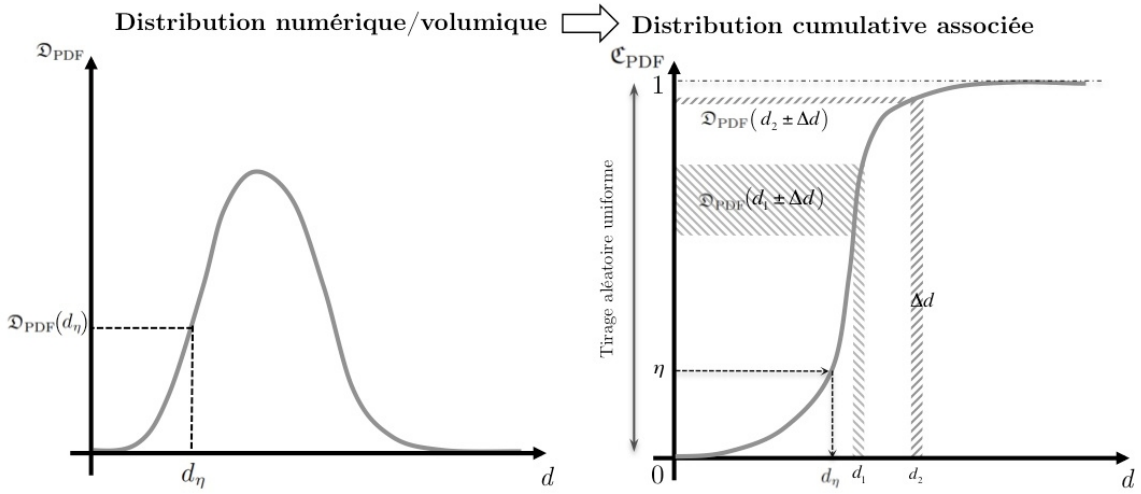

Figure 5.11 : *Illustration de la méthode de tirage pour obtenir une distribution discrète quelconque à partir de la distribution cumulative associée.*

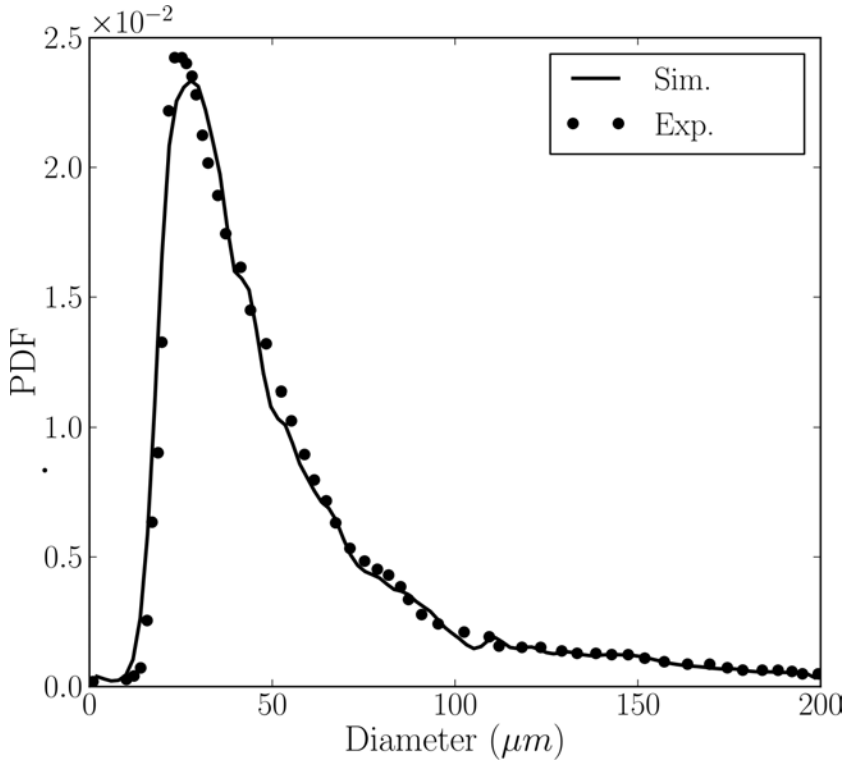

Figure 5.12 : *Application de la méthode d'injection d'une distribution discrète issue d'une expérience. Comparaison entre simulation et distribution numérique expérimentale de Mikami et al. [143].*

Chapitre 6

Conséquences de l'approche "point-source" en LES Euler-Lagrange

Avec la croissance des ressources de calcul, la finesse des maillages LES augmente progressivement, ce qui permet d'obtenir une meilleure résolution spatiale de la turbulence et de la chimie. Dans le cadre d'une LES utilisant une approche lagrangienne pour modéliser la phase liquide, cette diminution de la taille des cellules pose malheureusement problème, car l'une des principales hypothèses de la méthode lagrangienne risque d'être violée, comme illustré dans la première partie de ce chapitre. Lorsqu'une erreur "point-source" est susceptible d'apparaitre, une méthode d'étalement du terme source, qui permet de limiter cette erreur, est proposée dans la deuxième partie de ce chapitre et sera utilisée dans le chapitre 8 pour traiter les gouttes en combustion isolée.

6.1 Limitations de l'approche "point-source" en LES

Dans une LES Euler-Lagrange, on considère les gouttes du spray comme étant des points isolés dans l'espace, soumis aux conditions environnantes évaluées à la position de la goutte, désignées comme $f@p$ pour "fluide à la position de la particule". Ces conditions $f@p$ sont utilisées dans les modèles macroscopiques de traitement de l'évolution de la goutte (trainée, évaporation, etc.) et sont supposées représenter les conditions à l'infini de la goutte, c'est-à-dire non modifiées par la présence de la goutte.

Lorsque un couplage double est choisi entre les phases gazeuse et liquide (Sect. 4.1), les conditions $f@p$ sont nécessairement modifiées par la goutte, par le biais des termes sources liquide $\rightarrow$ gaz (transfert de quantité de mouvement, de vapeur ...). Afin de respecter la condition de non-pertubation du champ $f@p$ pour les modèles macroscopiques, ces termes sources doivent être suffisamment faibles devant les variations locales de l'écoulement[188].

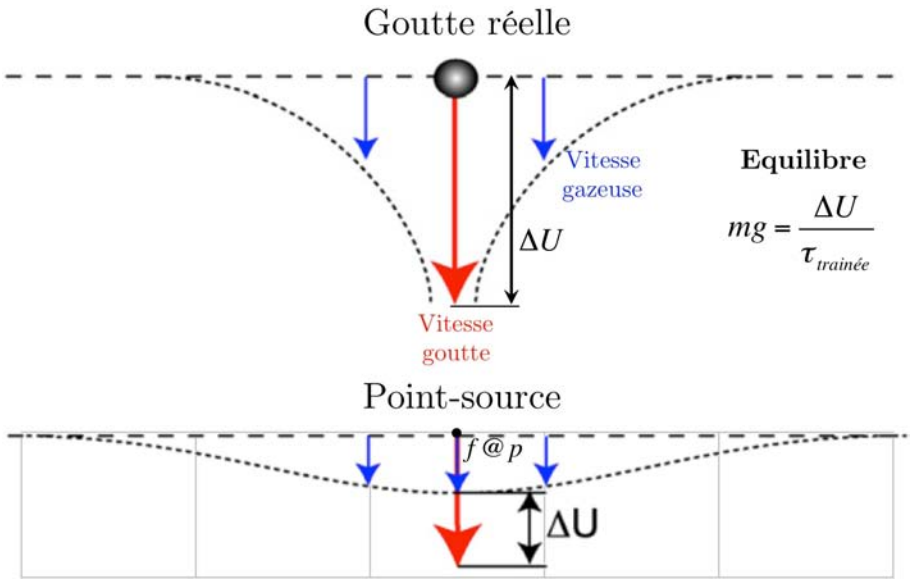

Figure 6.1 : *Illustration de l'erreur de prédiction de la vitesse limite de chute d'une goutte, due à l'approximation point-source (adapté de [105]).*

Dans le cas d'une goutte isolée en chute libre dans un écoulement, Jenny *et al.* illustrent le mécanisme entrainant une erreur de prédiction dans l'accélération et la vitesse limite de chute de cette goutte (Fig. 6.1). Dans ce cas, le fluide étant initialement au repos, la condition $f@p$ de vitesse gazeuse doit être nulle tout au long de la trajectoire de la goutte pour que la trainée soit bien évaluée. Or, le terme source liquide → gaz imprime au gaz une vitesse verticale du fait de l'entrainement du gaz par la trainée de la goutte. Si cette "perturbation" est trop importante, la vitesse gazeuse $f@p$ ne sera plus proche de zéro et l'évaluation de la vitesse relative de la goutte par rapport à l'écoulement sera plus faible que dans le cas réel, entrainant une sous-estimation de la trainée. De même, pour le cas d'une goutte isolée s'évaporant dans un atmosphère d'air au repos, Rangel *et al.* [168, 188] quantifie l'erreur faite sur le taux d'évaporation de la goutte. Dans ce cas, la condition à l'infini en température et en concentration de carburant doivent rester constante et égale aux conditions initiales, pour que l'évolution temporelle de la goutte soit bien reproduite par le modèle macroscopique d'évaporation. Or, de même que pour la trainée, le terme source liquide → gaz fournit de la vapeur de carburant et absorbe localement de l'énergie pour l'évaporation. Si cette "perturbation" est trop importante, l'environnement de la goutte, évalué en $f@p$, sera plus froid et plus concentré en vapeur de carburant que ce qu'il devrait être en réalité. Ces deux éléments entrainent une baisse du taux d'évaporation estimé par le modèle, et donc une erreur de prédiction sur le temps de vie de la goutte.

Rangel *et al.* [168, 188] montrent que l'erreur sur le terme source d'évaporation est inversement proportionnelle au rapport entre taille de l'élément Δx et diamètre de goutte d (Fig. 6.2). En effet, les conditions $f@p$ sont généralement obtenues par interpolation au premier ordre avec les

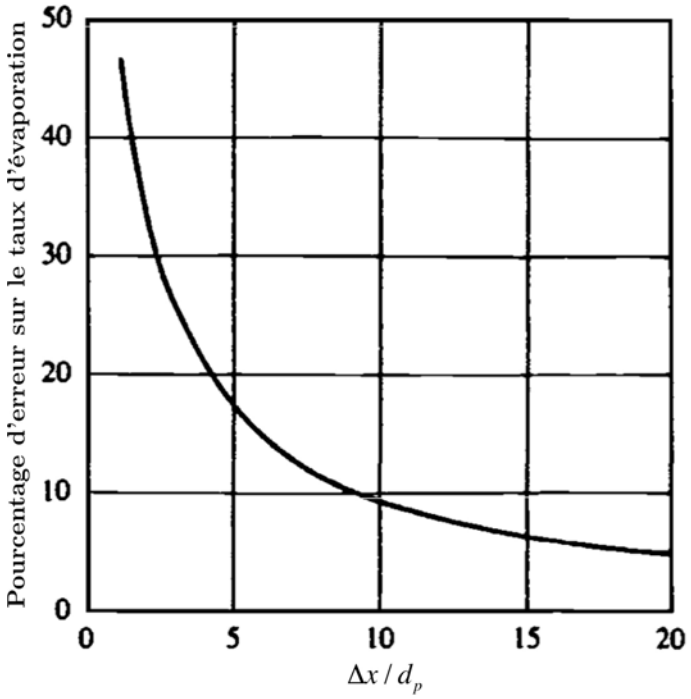

Figure 6.2 : *Evolution de l'erreur point-source sur le taux d'évaporation d'une goutte isolée au repos avec la taille de l'élément du maillage (adapté de [188]).*

sommets de l'éléments contenant la goutte[1], et les termes sources liquide → gaz sont transférés de manière conservative aux sommets de l'élément (Sect. 4.1.3). Lorsque la taille de l'élément Δx diminue par rapport à la taille de la goutte, la contribution volumique appliquée à chaque noeud voisin augmente par conservation, et l'erreur d'évaluation du champs $f@p$ augmente. La Fig. 6.2 montre que l'erreur de prédiction du taux d'évaporation pour une goutte 5 fois plus petite que la taille de maille est de l'ordre de 20%. Si l'on considère que ce niveau d'erreur est le maximum acceptable dans un calcul, le traitement d'une goutte de 100 μm contraint la taille de l'élément à être supérieure à 0,5 mm. Or, les tailles de mailles usuelles en LES s'approchent plutôt de 0,1 mm, soit de l'ordre de la taille de la goutte. Ces contraintes nouvelles nécessitent de mettre en place un traitement spécifique pour limiter l'erreur point-source dans les calculs LES Euler-Lagrange. Une première approche de correction est proposée dans la partie suivante.

Le niveau de l'erreur point-source mis en évidence par Rangel *et al.* [168, 188] peut être légèrement relativisé dans le cas d'une goutte évaporante en mouvement. En effet, la perturbation est progressivement convectée par l'écoulement, ce qui a tendance à limiter le niveau local de la perturbation autour de la goutte et l'erreur point-source associée. Dans ce cas, le critère sur la taille de l'élément de maillage par rapport à la goutte est moins contraignant. En revanche, il est très dépendant du contexte (moyenne et fluctuation de la vitesse relative entre la goutte et l'écou-

1. Seul l'élément est utilisé pour l'interpolation car il est couteux d'aller chercher des éléments voisins dans le cas des maillages non-structurés

lement, température environnante, taille de la goutte, modèles macroscopiques choisis...), ce qui ne permet pas d'établir facilement un critère universel permettant de quantifier l'erreur point-source. Dans la suite, on se place donc dans le cas particulier d'une goutte évaporante dans un écoulement faiblement convectif, pour construire une méthode de limitation de l'erreur point-source.

6.2 Méthode de limitation de l'erreur point-source

Dans une première approche, deux méthodes de limitation de l'erreur point-source sont envisageables :

- Méthode "globale" : on applique un filtrage global des champs perturbés, permettant de lisser les perturbations locales liées à la phase liquide, de manière conservative. Cette méthode a l'avantage d'être facile à implémenter et paralléliser, mais ne tient pas compte de l'origine locale de la perturbation. Par exemple, l'impact de centaines de petites gouttes concentrées en une petite zone peut être confondu avec celui d'une seule grosse goutte, la première situation correspondant à une perturbation d'origine physique (forte concentration) à l'inverse de la seconde, liée à l'erreur point-source.
- Méthode "locale" : on applique un filtrage local à chaque goutte susceptible de générer un problème point source. Cette méthode est plus coûteuse, du fait d'un traitement particulier, mais permet d'introduire une correction bien ciblée sur la perturbation d'une seule goutte.

Dans la suite, on s'appuiera essentiellement sur la deuxième méthode, puisque les erreurs que l'on traitera ne concerneront qu'un nombre limité de grosses gouttes. Le filtre appliqué autour de la goutte a pour conséquence d'étaler le terme source sur un volume indépendant du maillage, suffisamment large pour limiter la perturbation locale, et ainsi limiter l'erreur point-source (Fig. 6.3). Le paramêtre K, correspondant au diamètre du volume "cible" rapporté au diamètre de la gotute, est un paramètre d'entrée à définir selon l'importance estimée de la perturbation. Plus la perturbation liée au couplage est grande, plus K doit être grand. Les éléments de maillages appartenant à ce volume "cible" sont ensuite identifiés grâce à la connectivité du maillage. Cette opération est malheureusement relativement coûteuse, puisque le maillage est non-structuré. Le terme-source est ensuite redistribué de façon uniforme sur les sommets de ces éléments.

Comme l'opération de redistribution est relativement coûteuse et augmente avec la quantité d'éléments voisins à traiter, il est nécessaire de trouver un compromis entre réduction de l'erreur et coût de calcul associé à la réduction. Dans le cas d'une goutte isolée en combustion (Chap. 8), la perturbation locale est très importante, en termes de température et de modification locale du mélange. Dans ce cas, à partir de simulations 0D de gouttes isolées, le volume considéré comme suffisant pour limiter l'erreur correspond à $K = 17$, c'est-à-dire un diamètre du volume "cible" 17 fois plus grand que le diamètre de la goutte considérée. Le nombre d'éléments traités pour une goutte de 100 μm est de l'ordre de 200, mais diminue très vite avec le diamètre de goutte.

Cette méthode de redistribution ne fournit qu'une ébauche de réponse à un problème très complexe, rencontré au cours des calculs réalisés dans cette thèse, mais qui fera l'objet de recherche plus approfondies.

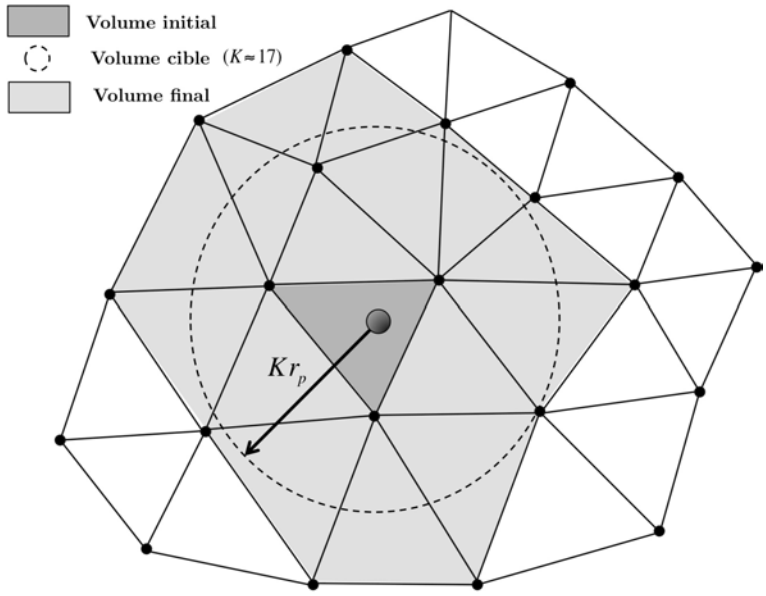

Figure 6.3 : *Procédure d'étalement des termes-sources sur un volume plus grand, afin de limiter l'erreur "point source".*

Chapitre 7

Optimisation de la convergence statistique des méthodes lagrangiennes

Sommaire

7.1 Contexte 119
7.2 Formulation du problème 120
7.2.1 Définitions 120
7.2.2 Distribution quelconque des particules numériques 121
7.3 Choix de la répartition des particules numériques 123
7.3.1 Critères de choix de la distribution et du débit des particules numériques 123
7.3.2 Résolution du spray à l'injection - Cas 0D 124
7.3.3 Impact sur la convergence statistique - cas 3D 128
7.4 Conclusions et perspectives sur l'optimisation de la convergence statistique . 135

7.1 Contexte

Pour des raisons évidentes de coût calcul, il n'est pas toujours possible de réaliser un calcul lagrangien déterministe, c'est à dire où chaque goutte composant le spray est suivie dans son évolution temporelle et spatiale. Dans ce cadre, le nombre de particules numériques utilisé pour représenter un échantillon de gouttes physiques est généralement choisi de manière à être inférieur au nombre de gouttes physiques. Ces particules numériques, qui transportent l'information de la phase liquide et sont en mouvement dans la géométrie, sont analogues aux degré de liberté d'un maillage, qui sont, eux, fixes puisqu'ils permettent de résoudre un système d' équations eulériennes. Au même titre que l'on choisit le raffinement local d'un maillage en fonction de la finesse et de l'importance des structures gazeuses que l'on cherche à capter, il est possible de choisir la répartition des particules numériques sur la distribution en taille de gouttes, afin de définir le nombre respectif de gouttes physiques par particules numériques. A l'heure actuelle, il n'existe pas véritablement

de méthodologie permettant de choisir le nombre et la répartition des particules numériques de la manière la plus judicieuse par rapport au contraintes de la simulation (précision, coût calcul). Les critères de choix sont multiples : quel diamètre privilégier par rapport à tel autre ? Quel nombre minimum de points pour obtenir une convergence statistique optimale ? Quel coût associé...

Dans cette partie, une méthodologie permettant de faire un choix judicieux de la répartition des particules numériques est proposée. Dans un premier temps, le problème est formalisé, afin de pouvoir injecter une répartition quelconque de particules numériques à l'injection du spray. Dans un deuxième temps, une nouvelle répartition permettant notamment d'améliorer la précision et la vitesse de convergence statistique de la phase liquide par rapport aux répartitions existantes, est proposée.

7.2 Formulation du problème

7.2.1 Définitions

- **Distribution en nombre** : on appelle distribution **en nombre** $\mathfrak{D}_N$ la fonction de probabilité qui exprime la probabilité $\mathfrak{D}_N(d)$ de trouver une goutte de diamètre d donné dans la population du spray. Généralement, la distribution en taille de goutte à l'injection est donnée sous cette forme.
- **Distribution en volume (ou en masse)** : on appelle distribution **en volume** $\mathfrak{D}_V$ la fonction de probabilité qui exprime la probabilité $\mathfrak{D}_V(d)$ de trouver un **volume** de gouttes de diamètre d dans la population de gouttes du spray. Cette distribution en volume a l'avantage de mieux prendre en compte l'importance des gouttes de grand diamètre, qui contribuent fortement à la masse mais faiblement au nombre, et ont donc une plus faible résolution statistique que les petites. Distributions en nombre et en volume sont liées par la relation suivante :

$$\mathfrak{D}_V(d) = \frac{d^3\mathfrak{D}_N(d)}{\int_0^\infty \mathfrak{D}_N(d')\mathrm{d}d'} \tag{7.1}$$

  La distribution en taille de goutte peut donc être donnée en termes de distribution en nombre ou en volume, en fonction de l'information que l'on cherche à bien représenter (répartition du nombre ou de la masse, respectivement).
- **Distribution cumulative** : cette distribution, notée $\mathfrak{C}$, correspond au cumul d'une distribution $\mathfrak{D}$. Elle est définie comme :

$$C_k(d) = \frac{\int_0^d \mathfrak{D}(d')\mathrm{d}d'}{\int_0^\infty \mathfrak{D}(d')\mathrm{d}d'} \tag{7.2}$$

  Cette distribution est par définition monotone, croissante, et varie de 0 à 1 sur $[0,\infty]$. Cette distribution est particulièrement utile pour transférer la distribution $\mathfrak{D}$, non uniforme, en un tirage uniforme entre 0 et 1, comme illustré en Fig. 5.11.

Dans la suite, on parlera de deux distributions en particulier :

- **Distribution réelle** $\mathfrak{D}^{\text{réelle}}$: c'est la distribution que doit suivre la population physique des gouttes injectées dans le calcul. Elle peut être exprimée en nombre, en volume ou sous forme cumulative.
- **Distribution des particules numériques** : cette distribution, notée $\mathfrak{D}_P$ correspond à la distribution **en nombre** des particules numériques en fonction du diamètre de goutte. $\mathfrak{D}_P(d)$ correspond au nombre de gouttes physiques de diamètre d représentées par une particule numérique de même diamètre. C'est cette distribution qui fait l'objet de la présente méthode de détermination.

7.2.2 Distribution quelconque des particules numériques

Une particule numérique k est entièrement définie par deux quantités transportées au cours du calcul :

- d_p^k, qui correspond au diamètre des gouttes que représente cette particule numérique.
- N_g^k : il s'agit du nombre de gouttes physiques que représente cette particule numérique [1]. Ce nombre peut être **non-entier**, voire inférieur à 1. Dans ce cas, une particule numérique représente une fraction de goutte physique.

La population de particules numériques injectées doit respecter deux contraintes afin de décrire le spray :

- La masse totale de particules numériques injectées par seconde doit être égale au débit liquide $\dot{M}_{liq}$, qui est une donnée d'entrée.
- La population de gouttes représentées par l'ensemble des particules numériques doit suivre la distribution en taille de goutte $\mathfrak{D}^{\text{réelle}}$, qui est, elle aussi, une donnée d'entrée.

La masse de la particule numérique découle directement du couple (d_p^k,N_g^k) et n'a donc pas besoin d'être transportée.

Il est possible de choisir le nombre de gouttes physiques N_g^k pour chaque particule numérique de manière arbitraire, en respectant les deux contraintes précédentes. Pour cela, on définit une fonction quelconque et strictement positive $M_P(d)$, qui représente pour un diamètre d donné la masse transportée par une particule numérique k de diamètre d_p^k. Plusieurs exemples de fonctions pour $M_P(d)$ seront présentées dans la suite. La fonction $M_P(d)$ pilote deux aspects de l'injection des particules numériques :

- Elle définit l'importance respective d'un diamètre par rapport à un autre. Par exemple, si $M_P(d_p^1) > M_P(d_p^2)$, il faudra plus de particules numériques de diamètre d_2 que de diamètre d_1 pour obtenir la même masse liquide totale. Dans ce cas, le diamètre d_p^2 est donc plus important statistiquement.
- Elle définit le nombre de particules numériques injectées par seconde par rapport au nombre de gouttes physiques injectées dans le cas réel. Par exemple, si la masse $M_P(d_p^1)$ est supérieure

1. Variable *rparcel_loc* dans le code AVBP.

à la masse d'une goutte de diamètre d_p^1, le nombre de particules numériques discrétisant la classe de diamètre d_p^1 sera moins grand que le nombre de gouttes physiques de diamètre d_p^1.

Par conservation de la masse dans chaque classe de diamètre d, la distribution en nombre des particules numériques $\mathfrak{D}_P$ vérifie nécessairement :

$$M_P(d)\,\mathfrak{D}_P(d) = \frac{\Pi \rho_l d^3}{6} \mathfrak{D}_N^{\text{réelle}}(d) \tag{7.3}$$

où $\mathfrak{D}_N^{\text{réelle}}$ est la distribution réelle de goutte exprimée en nombre.

A partir de cette relation de conservation, il est possible d'obtenir la distribution en nombre que doivent suivre les particules numériques :

$$\mathfrak{D}_P(d) = \frac{\Pi \rho_l d^3}{6\,M_P(d)} \mathfrak{D}_N^{\text{réelle}}(d) \tag{7.4}$$

En tirant aléatoirement dans la distribution $\mathfrak{D}_P(d)$ normalisée et en suivant la méthodologie détaillée en Chap. 5.2, on obtient une population de particules numériques qui suit la distribution en taille, tout en respectant le nombre de particules numériques par goutte physique, défini par $M_P(d)$.

La quantité N_g^k est obtenu pour une particule numérique k à partir de la relation suivante :

$$N_g^k = \frac{M_P(d_p^k)}{\Pi \rho_l (d_p^k)^3/6} \tag{7.5}$$

.

A chaque itération de pas de temps physique Δt, des particules numériques sont injectées jusqu'à ce que la somme des masses de particules numériques injectées ait atteint la totalité de la masse à injecter à cette itération, à savoir $\dot{M}_{liq}\Delta t$. Par cette approche, on a finalement injecté en un temps Δt un ensemble de particules numériques k de diamètres différents d_p^k, qui représentent chacune N_g^k gouttes, et suivent la distribution d'entrée en taille $\mathfrak{D}_N^{\text{réelle}}$ et un débit massique $\dot{M}_{liq}$. On désignera comme débit de particules numériques, $\dot{N}_P$, le nombre de particules numériques injectées par seconde. Il est obtenu par conservation du débit injecté sous forme de particules numériques :

$$\dot{N}_P = \frac{\dot{M}_{liq}}{\int_0^\infty M_P(d')\mathfrak{D}_P(d')\mathrm{d}d'} \tag{7.6}$$

Le débit liquide $\dot{M}_{liq}$ s'exprime en fonction du débit en nombre de gouttes physiques injectées, noté $\dot{N}_{inj.}$, par :

$$\dot{M}_{liq} = \int_0^\infty \frac{\Pi}{6} \rho_l d'^3 \mathfrak{D}_N^{\text{réelle}}(d')\mathrm{d}d' \times \dot{N}_{inj.} \tag{7.7}$$

Le débit de particules numériques est donc lié au nombre de gouttes physiques injectées par seconde, par la relation :

$$\dot{N}_P = \frac{\int_0^\infty \frac{\Pi}{6} \rho_l d'^3 \mathfrak{D}_N^{\text{réelle}}(d')\mathrm{d}d'}{\int_0^\infty M_P(d')\mathfrak{D}_P(d')\mathrm{d}d'} \times \dot{N}_{inj.} = G\dot{N}_{inj.} \tag{7.8}$$

Cette méthode est codée dans AVBP, afin de pouvoir introduire toutes sortes de répartitions de particules numériques, par la donnée de $M_P(d)$. Il reste à déterminer la fonction $M_P(d)$, dont le choix a un impact direct sur la convergence statistique et fait l'objet des sections suivantes.

7.3 Choix de la répartition des particules numériques

7.3.1 Critères de choix de la distribution et du débit des particules numériques

Le choix du débit de particules numériques est piloté par les considérations suivantes :

- **Limite liée à la capacité de calcul :** comme évoqué précédemment, il n'est généralement pas abordable de résoudre l'ensemble des gouttes du spray dans une configuration industrielle. Le nombre de particules numériques se traduit directement en coût CPU, qui est le premier paramètre de contrôle.
- **Convergence statistique** : dans certains cas, notamment dans les simulations d'allumage, on cherche à obtenir un champ convergé de répartition liquide en un temps physique le plus court possible. Etant donnée la faible résolution statistique d'une méthode lagrangienne, la convergence peut être accélérée en injectant plus de particules numériques que de gouttes physiques, chaque particule numérique représentant alors une fraction de goutte physique. Le surcoût de calcul de la phase liquide pour une itération est compensé par une économie sur le temps physique total simulé pour une même convergence statistique. Dans ce cas particulier, le choix du débit de particules numériques dépend de nombreux paramètres, comme le temps caractéristique des grandes structures de l'écoulement, le coût de la résolution de la phase gazeuse par rapport à la phase liquide ...

Le choix de la distribution des particules numériques est piloté par les considérations suivantes :

- **Bonne résolution de la distribution en masse du liquide** : la masse liquide injectée sous forme de gouttes peut être considérée comme la donnée la plus importante à garantir dans une simulation. En effet, le taux d'évaporation et le dégagement de chaleur sont fortement liés à la quantité de masse liquide pour chaque classe. A nombre de particules numériques équivalent, la masse liquide est mieux décrite en répartissant les particules numériques sur la distribution en taille exprimée sous forme volumique, comme illustré dans la partie suivante (Sect. 7.3.2).
- **Bonne résolution en tout point de la distribution en taille de gouttes** : l'un des objectifs d'une simulation lagrangienne est d'obtenir une distribution convergée de la population locale des gouttes en tout point du calcul. Dans ce cas, les particules numériques doivent être capables de reproduire précisément la distribution en taille à l'injection, comme illustré dans la partie suivante (Sect. 7.3.2).

Dans la suite, trois répartitions particulières sont proposées en prenant en compte les critères évoqués ci-dessus.

7.3.2 Résolution du spray à l'injection - Cas $0D$

7.3.2.1 Méthodes classiques de répartition

Deux répartitions de particules numériques sont communément utilisées dans les méthodes lagrangiennes :

- **Méthode "iso-N_{ptcl}"** : cette méthode consiste à répartir les particules numériques uniformément sur la distribution en taille exprimée en **nombre**. En d'autres termes, chaque particule numérique de diamètre d représente N gouttes physiques de même diamètre, avec N un réel ne dépendant pas du diamètre.
- **Méthode "iso-masse"** : cette méthode consiste à répartir les particules numériques uniformément sur la distribution en taille exprimée en **volume**. En d'autres termes, chaque particule numérique de diamètre d représente une masse M de gouttes physiques de même diamètre, avec M une masse liquide ne dépendant pas du diamètre de la classe.

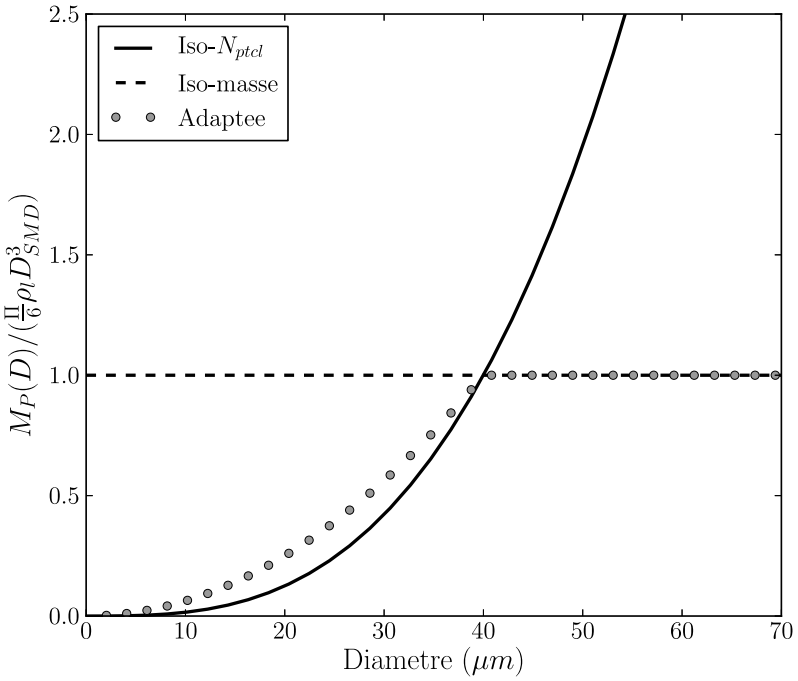

Figure 7.1 : *Variation relative de la masse d'une particule numérique de classe de diamètre d. La méthode iso-masse correspond à une masse de particule numérique constante, indépendante de d, la méthode iso-N_{ptcl} correspond à une masse de particule numérique proportionnelle à la masse d'une goutte (fonction d^3), la méthode adaptée correspond à une masse de particule numérique proportionnelle à d^2 pour $d < SMD$ et constante pour $d > SMD$.*

La méthode "iso-N_{ptcl}" revient à considérer que la masse d'une particule numérique est proportionnelle à la masse d'une goutte, c'est à dire $M_P(d) = N \times \pi\rho_l d^3/6$, avec N un nombre ne dépendant pas de d. La méthode lagrangienne déterministe exacte revient à poser $N = 1$ ("une

goutte = une particule numérique"). Pour $N > 1$, on utilise moins de particules numériques pour résoudre un certain nombre de gouttes physiques. Il est ainsi possible, par la valeur de N, de régler le débit de particules numériques par rapport au débit de gouttes physiques, suivant l'Eq. 7.8 :

$$\dot{N}_p^{\text{iso-}N_{ptcl}} = \frac{1}{N} \underbrace{\int_0^\infty \mathfrak{D}_N^{\text{réelle}}(d')\mathrm{d}d'}_{=1} \dot{N}_{inj.} = \frac{\dot{N}_{inj.}}{N} \tag{7.9}$$

Le débit de particules numériques est bien une fraction du débit réel de gouttes, d'un facteur $1/N$. La forme de $M_P^{\text{iso-}N_{ptcl}}(d)$ pour $N = 1$ est tracée en Fig. 7.1.

La méthode "iso-masse" revient à considérer que la masse d'une particule numérique ne dépend pas de d, c'est à dire $M_P(d) = M$, avec M un réel ne dépendant pas de d. On note que la distribution des particules numériques $\mathfrak{D}_P$ est bien égale dans ce cas à la distribution exprimée en volume à l'injection. La valeur de M pilote le débit de particules numériques relatif au débit de gouttes physiques, suivant l'Eq. 7.8 :

$$\dot{N}_P = \frac{\dot{M}_{liq}}{M} \tag{7.10}$$

Le facteur $1/M$ correspond au nombre de particules numériques par masse de carburant. La forme de $M_P^{iso-masse}(d)$ pour $M = \pi\rho_l(d_{SMD})^3/6$ est tracée en Fig. 7.1.

Dans la suite, on travaille à débit de particules numériques identiques pour comparer les différentes méthodes. N et M sont choisis de telle sorte que cette contrainte soit respectée. L'influence du débit de particules numériques sur la convergence statistique ne fait pas l'objet de la présente étude, qui se concentre uniquement sur l'influence de la distribution des particules numériques.

Le comportement à l'injection de ces deux méthodes "iso-N_{ptcl}" et "iso-masse" est illustré en Figs. 7.2 et 7.3, pour une injection de type Rosin-Rammler ($d_{\text{SMD}} = 40\mu m$ et $q = 2,5$). Les distributions obtenues après injection d'un grand nombre de particules numériques sont présentées et comparées aux distributions d'entrée en nombre et en volume. La distribution des particules numériques correspond au comptage du nombre de particules numériques par classe de diamètre. On observe logiquement que les particules numériques suivent parfaitement la distribution en nombre pour la méthode iso-N_{ptcl} d'une part, et en volume pour la méthode iso-masse, d'autre part.

En revanche, on remarque que, même pour un grand nombre de particules numériques injectées ($\sim 10^4$), la méthode iso-N_{ptcl} présente une erreur encore significative sur la distribution volumique, notamment pour les diamètres supérieurs à d_{SMD}, et la méthode iso-masse présente une erreur encore significative sur les petits diamètres, notamment pour les diamètres inférieurs à d_{SMD}. Ces deux constatations sont la conséquence de la répartition des particules numériques, à partir de la distribution en nombre pour la première méthode et sur la distribution en volume pour la deuxième. Dans la première méthode, relativement peu de particules numériques de grand diamètre sont injectées puisque les grosses gouttes sont moins présentes en nombre dans la distribution physique numérique. Dans la deuxième méthode, relativement peu de particules numériques de

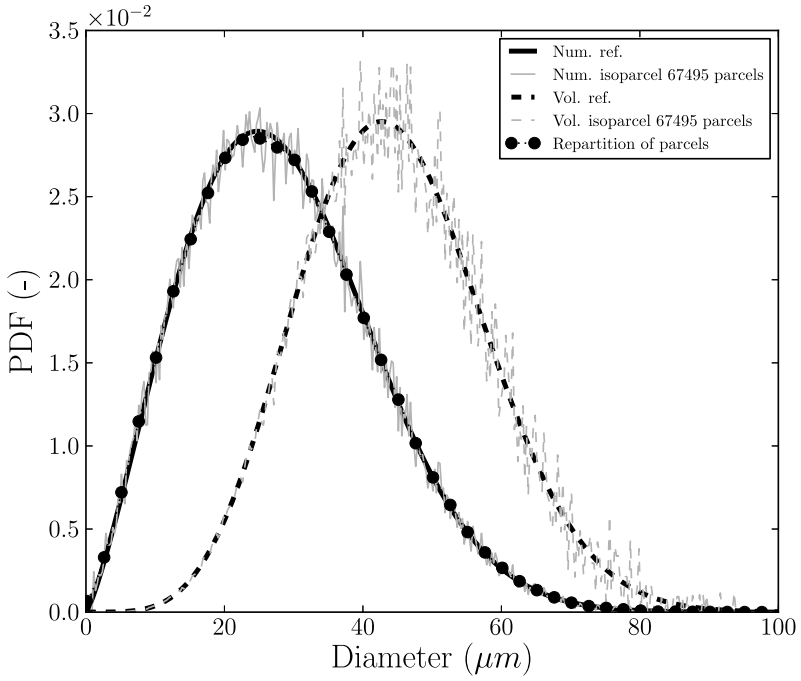

Figure 7.2 : *Méthode iso-N_{ptcl} : distribution en nombre et en volume obtenues après injection d'un grand nombre de particules numériques, par rapport à la distribution physique de référence (Rosin-Rammler). La répartition des particules numériques suit logiquement la distribution en nombre dans cette méthode.*

petite taille sont injectées, puisque les petites gouttes sont peu représentées dans la distribution physique volumique.

La décroissance de l'erreur au sens des moindres-carrés avec le nombre de particules numériques est présentée sur les figures 7.4 et 7.5. Une régression linéaire fournit les coefficients présentés dans le tableau 7.1. On remarque que la décroissance de l'erreur sur la distribution en nombre et en volume est environ proportionnelle à l'inverse du nombre de particules numériques, pour les deux méthodes. En revanche, on remarque que l'erreur initiale de ces deux méthodes est très différente. La méthode iso-N_{ptcl} présente une erreur plus conséquente que la méthode iso-masse pour la distribution volumique, et inversement pour la méthode iso-masse sur la distribution numérique. On remarque enfin que la méthode iso-masse semble avoir des difficultés particulières à converger au niveau des tous petits diamètres ($d < 10\mu m$), qui représentent une masse infime, mais dont la mauvaise résolution entraine des oscillations fortes sur la distribution numérique.

7.3.2.2 Amélioration de la répartition des particules numériques : méthode adaptée

En analysant les Figs. 7.2 et 7.3, on remarque que les deux méthodes précédentes correspondent à deux extrêmes en terme de répartition, l'une concentrant l'information sur les diamètres inférieurs

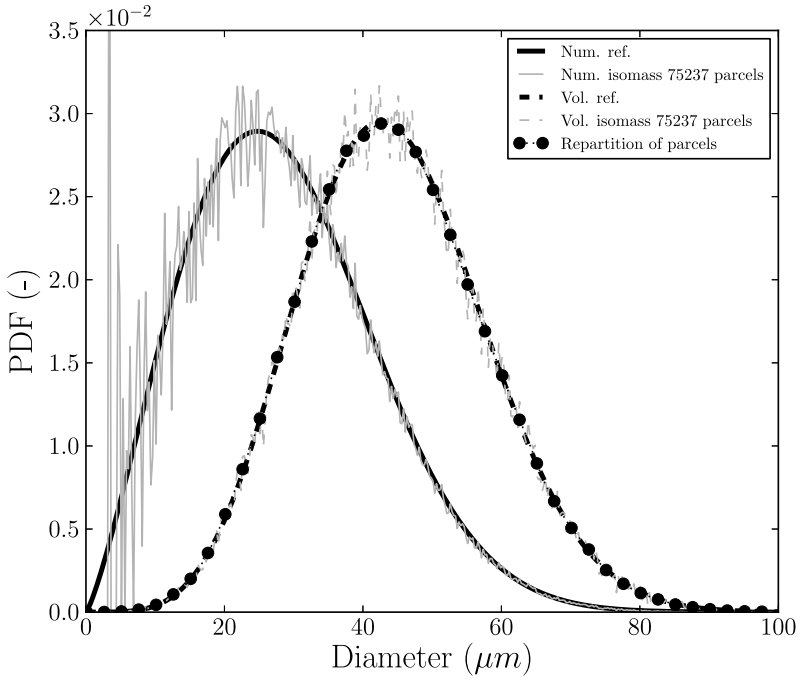

Figure 7.3 : *Méthode iso-masse : distribution en nombre et en volume obtenues après injection d'un grand nombre de particules numériques, par rapport à la distribution physique de référence (Rosin-Rammler). La répartition des particules numériques suit logiquement la distribution en volume dans cette méthode.*

Tableau 7.1 : *Régression linéaire sur l'erreur, de la forme* $e = A/(N_P)^B$

		iso-N_{ptcl}	iso-masse	adaptée
Nombre	A	11.9	21.2	12.8
	B	0.95	0.81	0.91
Volume	A	68.3	15.3	18.5
	B	1.0	1.0	1.0

au SMD et inversement. En analysant la Fig. 7.1, on remarque qu'il est possible de définir une masse de particules numériques $M_P(d)$ permettant de limiter les erreurs associées à la mauvaise résolution des petits diamètres tout en résolvant la masse liquide le mieux possible.

Une adaptation est proposée, de façon à ce que le facteur $d^3/M_P(d)$ de Eq. 7.4 soit linéaire en d pour $d < SMD$ et proportionnelle à d pour $d > SMD$. Ce choix revient à considérer une masse de particule numérique $M_P(d)$ proportionnelle à d^3 pour $d < SMD$ et constante pour $d > SMD$, comme illustré en Fig. 7.1. Pour $d > SMD$, la masse de particule numérique suit la méthode iso-masse. Pour $d < SMD$, la masse de particule numérique en d^2 est un compromis entre iso-masse (constante) et iso-N_{ptcl} (proportionnelle à d^3). La distribution associée est présentée en Fig. 7.6. Cette adaptation permet de fortement réduire l'erreur sur la distribution en nombre par rapport

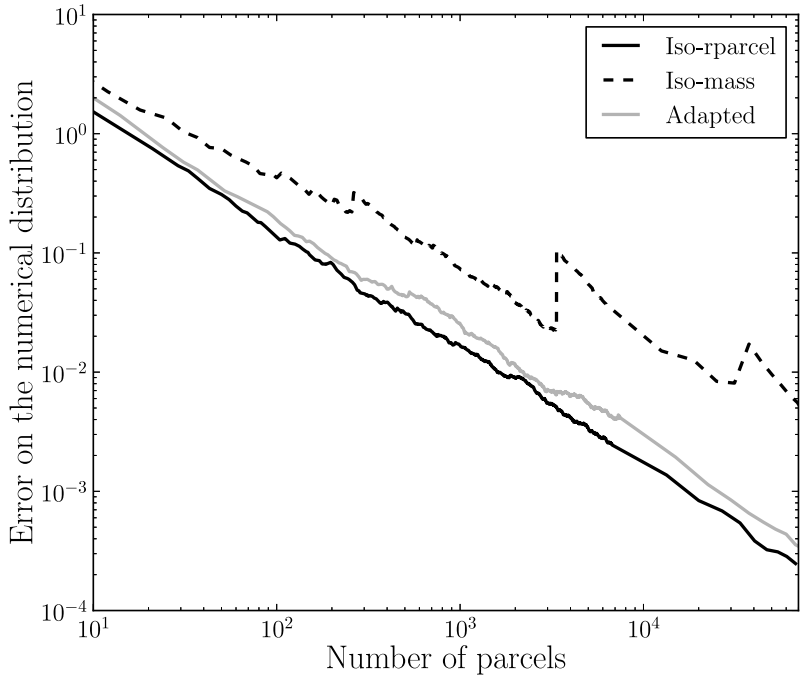

Figure 7.4 : *Evolution de l'erreur au sens des moindres-carrés sur la distribution* ***en nombre****, en fonction du nombre de particules numériques injectées, pour les trois différentes méthodes. Les valeurs des régressions linéaires sur ces résultats sont données en Tab. 7.1.*

à la méthode iso-masse, tout en maintenant une résolution de la distribution volume similaire à la méthode iso-masse (Tab. 7.1).

7.3.3 Impact sur la convergence statistique - cas 3D

7.3.3.1 Convergence statistique du spray

Pour représenter correctement l'ensemble des trajectoires possibles et leur distributions, des paramètres supplémentaires sont à prendre en compte, comme schématisé sur la figure 7.7 :

1. **Choix de la position initiale :** une fois son diamètre choisi, la particule numérique est injectée à travers une géométrie d'injecteur (injecteur Delavan, "air-blast", point, multi-points etc.). La position de la particule numérique sur cette géométrie est choisie de manière aléatoire, en fonction du modèle d'injecteur. Par exemple, pour un injecteur multi-points, où le spray est créé à partir d'un certain nombre de trous répartis sur une couronne, le point à partir duquel la particule numérique est injectée est tiré aléatoirement de manière uniforme sur l'ensemble des surfaces d'injection.

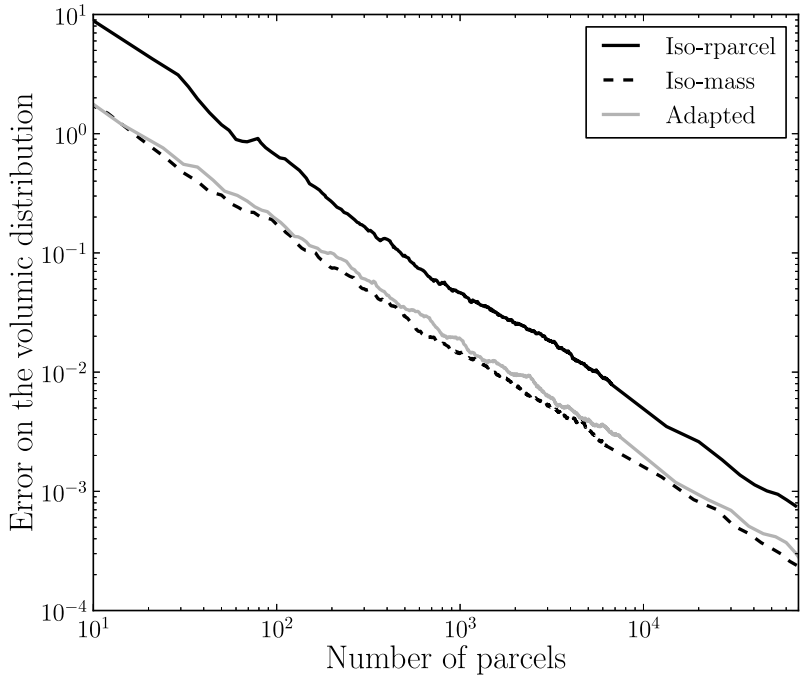

Figure 7.5 : *Evolution de l'erreur au sens des moindres-carrés sur la distribution* ***en volume****, en fonction du nombre de particules numériques injectées, pour les trois différentes méthodes. Les valeurs des régressions linéaires sur ces résultats sont données en Tab. 7.1.*

2. **Choix de la vitesse initiale** : la vitesse des gouttes du spray suit aussi une distribution particulière en terme d'intensité et de direction, déterminée par le modèle d'injecteur (par exemple, FIMUR [104]). Ce choix fait aussi intervenir une ou deux variables aléatoires.
3. **Dispersion turbulente :** la particule numérique est transportée par un écoulement instationnaire, ayant son propre comportement statistique. La trajectoire de la particule numérique dépend du comportement inertiel des gouttes qu'elle représente (cf. Sect. 2.2.2).

La position de la particule numérique à l'instant t dépend donc de l'histoire vue par cette particule numérique depuis sa position initiale sur la géométrie de l'injecteur. Afin d'évaluer la convergence statistique spatiale des différentes méthodes, la configuration du chapitre 10 est utilisée. La convergence statistique locale ne sera évaluée que sous les trois aspects principaux suivants :

1. **Convergence de la charge massique liquide locale :** c'est la quantité la plus importante puisqu'elle pilote en grande partie l'intensité des processus liés à la combustion (taux d'évaporation, de combustion, de refroidissement etc).
2. **Convergence de la fraction massique locale de carburant gazeux**, issu de l'évaporation et qui découle essentiellement de la charge liquide.
3. **Convergence de la population locale de gouttes :** en tout point d'un calcul statistiquement convergé, on souhaite obtenir la distribution en taille de goutte présente localement. Cette

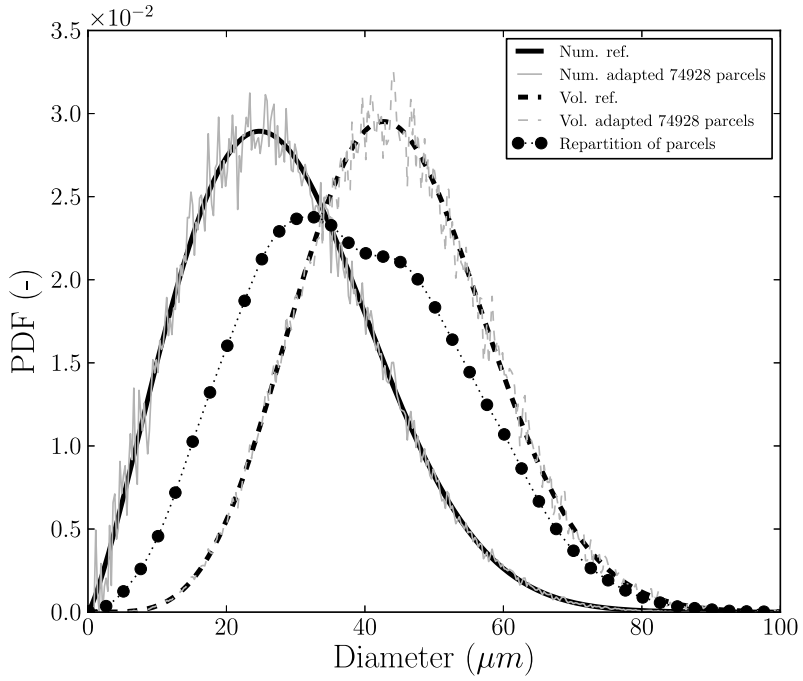

Figure 7.6 : *Méthode adaptée : distribution en nombre et en volume obtenues après injection d'un grand nombre de particules numériques, par rapport à la distribution physique de référence (Rosin-Rammler). La répartition des particules numériques se situe entre la distribution en nombre et en volume dans cette méthode.*

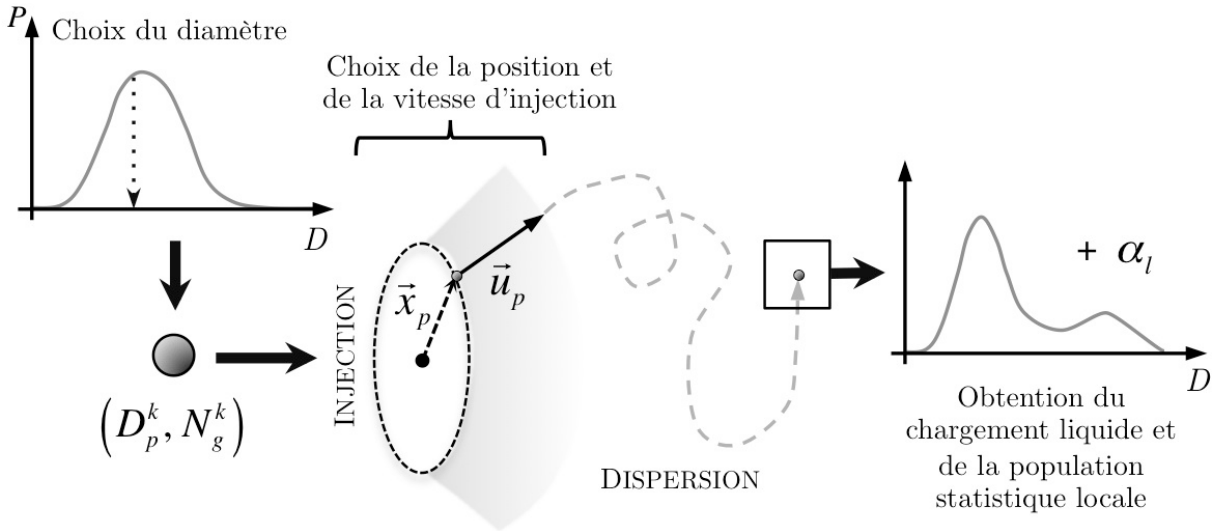

Figure 7.7 : *Les différents choix paramétriques influant sur la distribution physique locale de gouttes dans le spray.*

donnée est généralement plus longue à obtenir de manière complète, notamment dans les zones faiblement chargées. En effet, il est nécessaire de voir passer, en un point, un grand nombre de particules numériques pour avoir un échantillon statistique représentatif de la population locale.

La convergence statistique des vitesses et températures liquides n'est pas analysée, notamment parce qu'elle dépend fortement de la bonne convergence des trois quantités précédentes.

La géométrie du calcul, le système d'injection, la distribution physique à l'injection et les conditions aux limites de la configuration testée sont détaillées au chapitre 10. Il s'agit d'un système d'injection à cône creux, qui forme un spray suivant une distribution physique Rosin-Rammler similaire à celle utilisée en Sect. 7.3.2. Ce spray est injecté dans une chambre cubique fortement turbulente, qui présente un écoulement rotatif et recirculant, typique d'une chambre de combustion industrielle. Cette configuration académique a l'avantage d'introduire l'ensemble des paramètres influant sur la convergence statistique illustrés en Fig. 7.7.

Trois simulations sont réalisées avec les trois méthodes de répartition présentées en Sect. 7.3.2, toutes autres choses étant égales par ailleurs. Le débit de particules numériques est notamment le même pour toutes les méthodes : seule change la répartition de ces particules numériques sur la distribution en taille à l'injection. Dans un premier temps, la convergence statistique locale de la masse est analysée sur les champs moyens. Dans un deuxième temps, la convergence statistique locale des populations des gouttes est analysée en utilisant les champs instantanés.

7.3.3.2 Analyse de la convergence statistique à partir des champs moyens

L'injection est d'abord activée pendant environ 2 ms, pour commencer à établir le spray. A partir de 2 ms, la moyenne temporelle est activée. Les champs moyens de fraction volumique liquide sont présentés pour les trois méthodes en Fig. 7.8, dans une coupe perpendiculaire verticale de la chambre. La moyenne temporelle a été effectuée sur 4 ms, ce qui explique la faible quantité de masse liquide présente loin de l'injecteur et la faible résolution statistique des zones avales.

Les trois champs sont très similaires à première vue, notamment dans la zone proche du cône creux créé par le système d'injection. Dans les détails, on remarque que la charge en champ lointain, pour les méthodes iso-masse et adaptée, est localement plus grande que pour la méthode iso-N_{ptcl}, pour un même temps de moyenne. Ce sont les grosses gouttes, plus nombreuses en nombre dans ces méthodes, qui contribuent en premier dans la zone avale, du fait de leur inertie. En effet, elles sont peu déviées par l'écoulement et ont une trajectoire directe vers l'aval de la chambre.

Proche de l'injecteur, la méthode iso-masse présente une charge très localisée au niveau du cône creux du spray, tandis que les méthodes iso-N_{ptcl} et adaptée présentent un champ plus diffus autour du cône creux. Ce sont les petites gouttes, ralenties et déviées dès les premiers instants après leur injection, qui entrainent la présence d'une masse liquide à cet endroit. De plus, la présence de petites cellules de recirculation accentue la ségrégation préférentielle dans la zone proche injecteur.

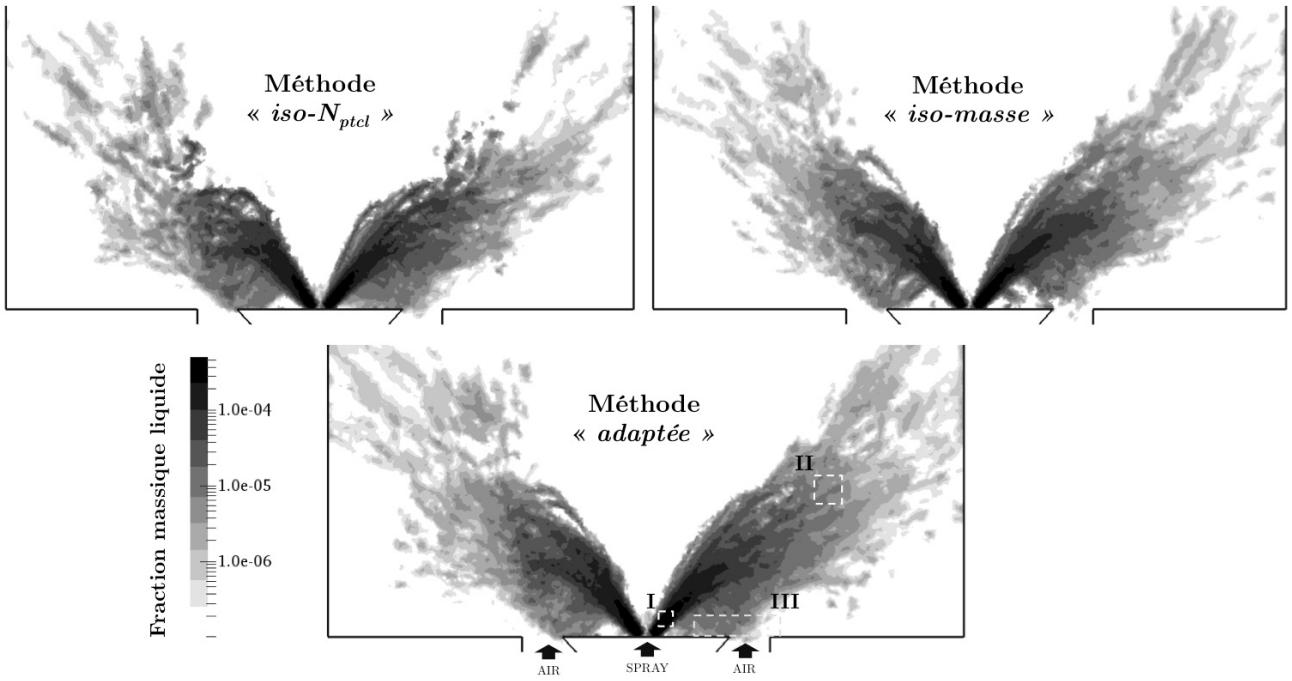

Figure 7.8 : *Champ moyens de fraction volumique liquide, dans une coupe verticale centrée sur l'injecteur, pour les trois méthodes. Les trois boites blanches correspondent aux zones d'études plus détaillées des populations locales de gouttes.*

Ces mécanismes seront analysés dans la suite en regardant la convergence de la population locale dans les trois boites schématisées en Fig. 7.8.

Il est possible d'analyser de la même façon les champs de vapeur de carburant et de température. Chacune des trois méthodes génère un champ moyen très similaire, hormis les petites différences observées sur la répartition liquide. Ces champs ne sont pas montrés.

En conclusion de cette première analyse, il est observé que la masse liquide en aval de la chambre sera plus vite convergée avec une méthode mettant l'accent sur la résolution de la masse, puisqu'un plus grand nombre relatif de particules numériques de grand diamètre sont injectées dans ces méthodes. En revanche, en mettant trop l'accent sur la résolution des grosses gouttes, il est possible de fortement sous-évaluer certaines zones chargées en petites gouttes, mal résolues dans une méthode iso-masse (cf. Sect. 7.3.2).

7.3.3.3 Impact sur la population de gouttes

La distribution locale des gouttes est analysée dans les trois boites disposées en Fig. 7.8, en analysant la population des particules numériques comprise entre les coordonnées (r_{min}, Z_{min}) et (r_{max}, Z_{max}) de chaque boite, dans un référentiel cylindrique centré sur l'axe de la chambre.

La boite I correspond à la population juste en aval de l'injection. La boite II correspond à une zone en dehors du coeur central du spray conique, après que les effets d'inertie aient suffisamment joué. La boite III correspond à une zone chargée par les mouvements de recirculation proche-injecteur, pour laquelle une différence notable est observée sur la charge liquide moyenne pour les différentes méthodes.

La distribution locale de référence, qui servira de point de comparaison, est obtenue en simulant et en intégrant un temps physique plus important sur un calcul avec la méthode iso-N_{ptcl} (avec $N = 1$). Il a été possible d'obtenir 16 ms de temps physique sur ce calcul lagrangien, ce qui permet d'obtenir des distributions locales suffisamment convergées pour mesurer une erreur de convergence. Les distributions locales en nombre et en volume obtenues avec les trois méthodes sont comparées aux distributions locales de référence, et l'évolution de l'erreur moindres carrés en fonction du temps de moyenne est comparée pour les différentes méthodes. Les résultats sont disponibles sur les Figs. 7.9, 7.10 et 7.11, en termes de distribution en nombre et en volume après 5 ms de moyenne, par rapport à la référence (16 ms de moyenne, lagrangien déterministe), de décroissance de l'erreur avec le temps de moyenne, de répartition des particules numériques à 5 ms et du nombre de particules numériques comptées dans la boite en fonction du temps de moyenne.

Dans la boite I (Fig. 7.9), située dans le coeur dense du spray, proche de l'injection, un nombre important de particules numériques est rapidement obtenu du fait de la proximité de l'injecteur. L'erreur minimum est obtenue au bout de $1ms$ pour les trois méthodes. On retrouve les grandes tendances déjà observées pour la distribution à l'injection (Sect. 7.3.2), mais accentuées par l'accumulation des petites gouttes en sortie d'injecteur. Cette accumulation est due au fort ralentissement des petites gouttes, de leur vitesse d'injection (de l'ordre de 15 m/s) à la vitesse de la phase gazeuse (de l'ordre du m/s). Ainsi, la distribution locale proche injecteur est déplacée vers les petits diamètres. Ce comportement proche-injecteur accentue l'erreur faite par la méthode iso-masse. En effet, l'erreur sur la distribution numérique de la méthode iso-masse se stabilise à un niveau plus important par rapport aux deux autres méthodes, ce qui pouvait être prévisible. En revanche, l'erreur sur la distribution volumique se stabilise à un niveau supérieur aux autres méthodes, ce qui est plutôt étonnant à première vue pour cette méthode, sensée mieux représentée la masse.

Lorsqu'on observe les distributions obtenues après stabilisation de l'erreur, on remarque qu'un décalage important subsiste pour les petits diamètres pour la méthode iso-masse. Avec l'accumulation des petits diamètres, cette classe de goutte contribue de manière significative à la masse liquide locale. Ainsi, la méthode iso-masse conserve toujours une erreur plus importante sur la distribution volumique, par rapport aux deux autres méthodes, bien qu'elle soit à même de mieux résoudre la masse. L'erreur faite par la méthode adaptée sur la distribution numérique se situe entre l'erreur faite par la méthode iso-N_{ptcl} et la méthode iso-masse, permettant de limiter l'erreur faite sur les petits diamètres. De même, sur la distribution volumique, l'erreur est identique à la méthode iso-N_{ptcl}. Enfin, la répartition des particules numériques s'établit logiquement par rapport aux méthodes de répartition : méthode iso-N_{ptcl} plus centrée sur les petits diamètres, méthode iso-masse sur les grands et méthodes adaptée entre les deux.

Dans la boite II (Fig. 7.10), située en aval du coeur dense du spray, on remarque tout d'abord que la croissance du nombre de particules numériques par rapport au temps de moyenne est plus grande pour les méthodes iso-masse et adaptée que pour la méthode iso-N_{ptcl}. Ce sont les grosses gouttes, qui parviennent en premier dans cette zone, du fait d'une conservation plus longue de leur inertie. Ces grosses gouttes sont plus nombreuses dans ces deux méthodes, et peuplent ainsi plus rapidement la distribution locale par rapport à la méthode iso-N_{ptcl}. Les erreurs sur les distributions numérique et volumique décroissent plus rapidement dans les méthodes iso-masse et adaptée. En revanche, on remarque que l'erreur de la méthode iso-masse atteint une valeur stabilisée plus importante que les autres méthodes, du fait de la mauvaise résolution des petits diamètres, qui finit par pénaliser la méthode lorsque l'essentiel de la masse est convergé.

Dans la boite III (Fig. 7.11), située en périphérie de la direction du cône creux, on trouve une population de gouttes plutôt centrée sur les petits diamètres. Ce comportement est dû au fait que ce sont les petites gouttes qui sont déviées de leur trajectoire initiale et entrainées dans les zones de recirculation périphériques au spray. On remarque que le nombre de particules numériques comptées dans la méthode iso-masse est très inférieur au nombre de particules numériques comptées dans les deux autres méthodes, ce qui entraine une erreur significativement plus importante sur la distribution numérique, et une erreur relativement plus grande sur la distribution volumique. La méthode adaptée se comporte sensiblement comme la méthode iso-N_{ptcl}. La répartition locale des particules numériques est très similaire pour les méthodes iso-N_{ptcl} et adaptée, et décentrée vers les diamètres plus grand pour la méthode iso-masse.

En observant la convergence statistique de la population locale dans les trois boites pour les trois méthodes, il est possible de tirer les conclusions suivantes :

- La méthode iso-masse converge généralement plus rapidement sur la distribution en volume locale, notamment lorsque l'on s'éloigne du point d'injection, mais cette convergence se fait au prix d'une perte non négligeable d'information sur la répartition spatiale des petites gouttes, qui peut fortement limiter la convergence de la distribution locale dans certain cas. De plus, une partie de la ségrégation préférentielle du spray par l'écoulement est mal captée par cette méthode. Cet aspect peut avoir un fort impact sur la précision du calcul, notamment si les zones chargées en petites gouttes jouent un rôle particulièrement important dans la stabilisation de la flamme, pour ne citer que cet exemple.
- La méthode iso-N_{ptcl} permet d'obtenir une convergence de la population locale satisfaisante, sur l'ensemble des diamètres possibles, mais généralement au prix d'un temps de moyenne plus important que les deux autres méthodes, notamment en ce qui concerne la convergence de la charge liquide.
- La méthode adaptée permet d'obtenir un compromis satisfaisant sur la convergence statistique, en conservant une vitesse rapide de convergence sur la distribution en volume, similaire à la convergence de la méthode iso-masse, tout en maintenant une résolution suffisante de la population en petites gouttes, afin de reproduire les tendances observées sur la méthode iso-N_{ptcl}.

Ainsi, si une convergence statistique spatiale du spray la plus rapide est recherchée, l'adaptation de la répartition des particules numériques proposés ici, qui n'est pas forcément la répartition optimale, permet de conserver l'avantage de la méthode iso-masse, tout en limitant ses principales limites. De plus, lorsque le nombre de particules numériques est très limité par rapport au nombre réel de gouttes, cette méthode permet de placer les particules numériques de manière plus optimale que les deux méthodes classiques, afin d'obtenir une résolution plus fidèle de la charge liquide et une convergence statistique générale accrue.

7.4 Conclusions et perspectives sur l'optimisation de la convergence statistique

Dans ce chapitre, on a tout d'abord formalisé le problème de répartition des particules numériques sur la distribution en taille de gouttes, et proposé une méthode permettant d'injecter n'importe quelle distribution de particules numériques. Le choix de distribution permet de piloter la représentativité statistique d'une classe de diamètre par rapport à une autre, et le nombre de particules numériques utilisés pour le calcul. L'analyse de la convergence statistique de différentes distributions de particules numériques a ensuite permis de souligner l'importance de choisir judicieusement cette distribution en fonction des objectifs de la simulation et des contraintes associés aux calculs (temps CPU, précision ...). Enfin, une nouvelle distribution de particules numériques a été proposée, permettant d'améliorer significativement la convergence statistique de la phase liquide par rapport aux deux méthodes usuelles de répartition.

Bien que la convergence statistique en soit améliorée, la distribution adaptée n'est pas nécessairement optimale et sa construction dépend en partie du cas particulier étudié. En revanche, la méthodologie proposée peut être reprise pour améliorer encore la convergence statistique ou traiter des distributions en taille très particulière (distribution bi-modale [2]). Cette étude sur la convergence statistique fait également apparaître de nombreuses nouvelles questions, sans réponse à l'issue de ce travail : comment définir le nombre abordable de particules numériques dans un calcul ? Quel équilibre entre nombre de particules numériques injectées et temps physique simulé permettant d'obtenir la meilleure convergence statistique ? Comment généraliser le choix de répartition de particules numériques pour le rendre indépendant du cas d'étude ?

2. "Comme un chameau" précise ma petite fille Agathe :)

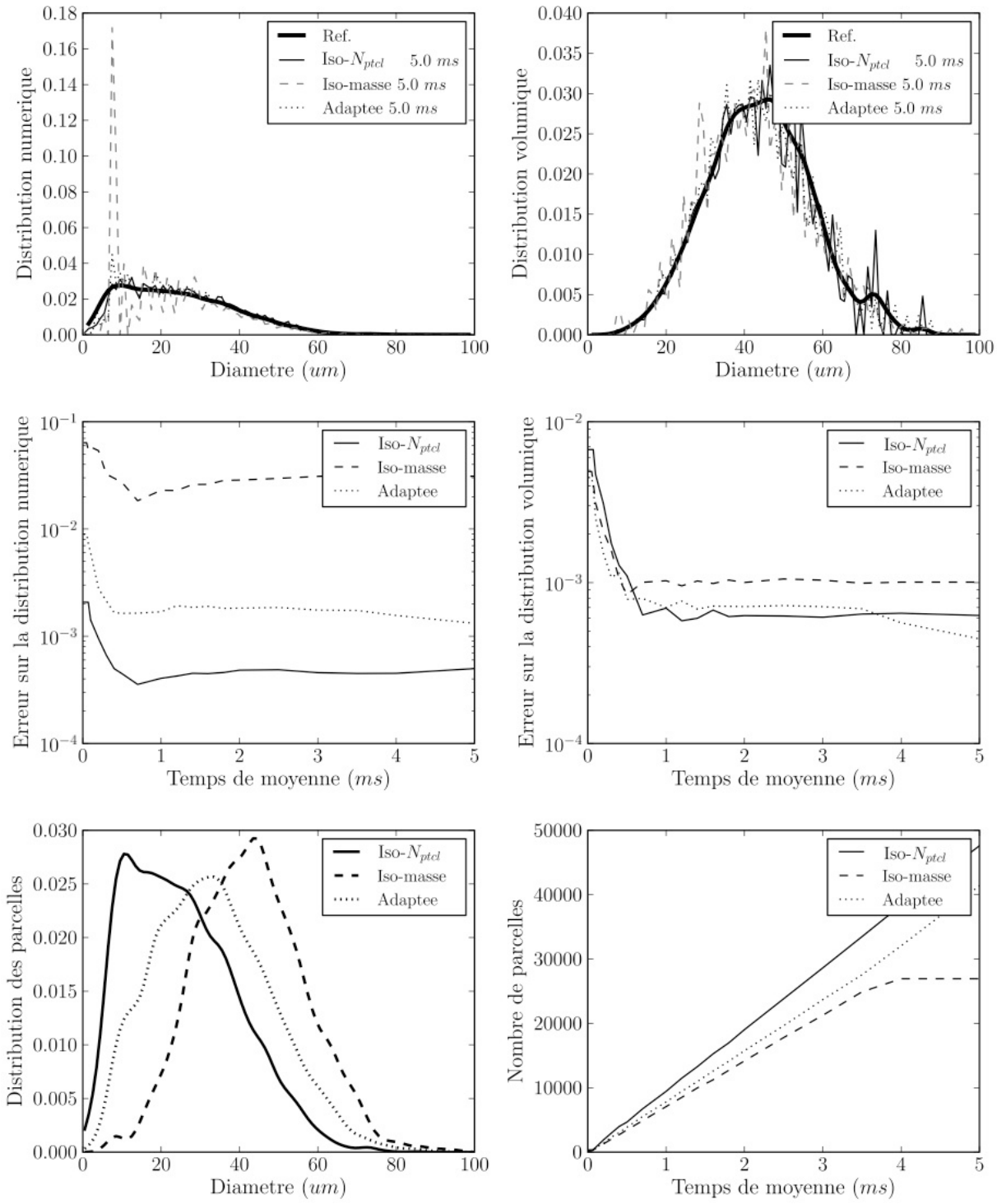

Figure 7.9 : *Population locale dans la boite I (Fig. 7.8) pour les trois méthodes. Dans l'ordre : distribution en nombre, en volume par rapport à la population de référence (16 ms de convergence), erreur sur la distribution en nombre, en volume, distribution des particules numériques et nombre de particules numériques comptées en fonction du temps de moyenne.*

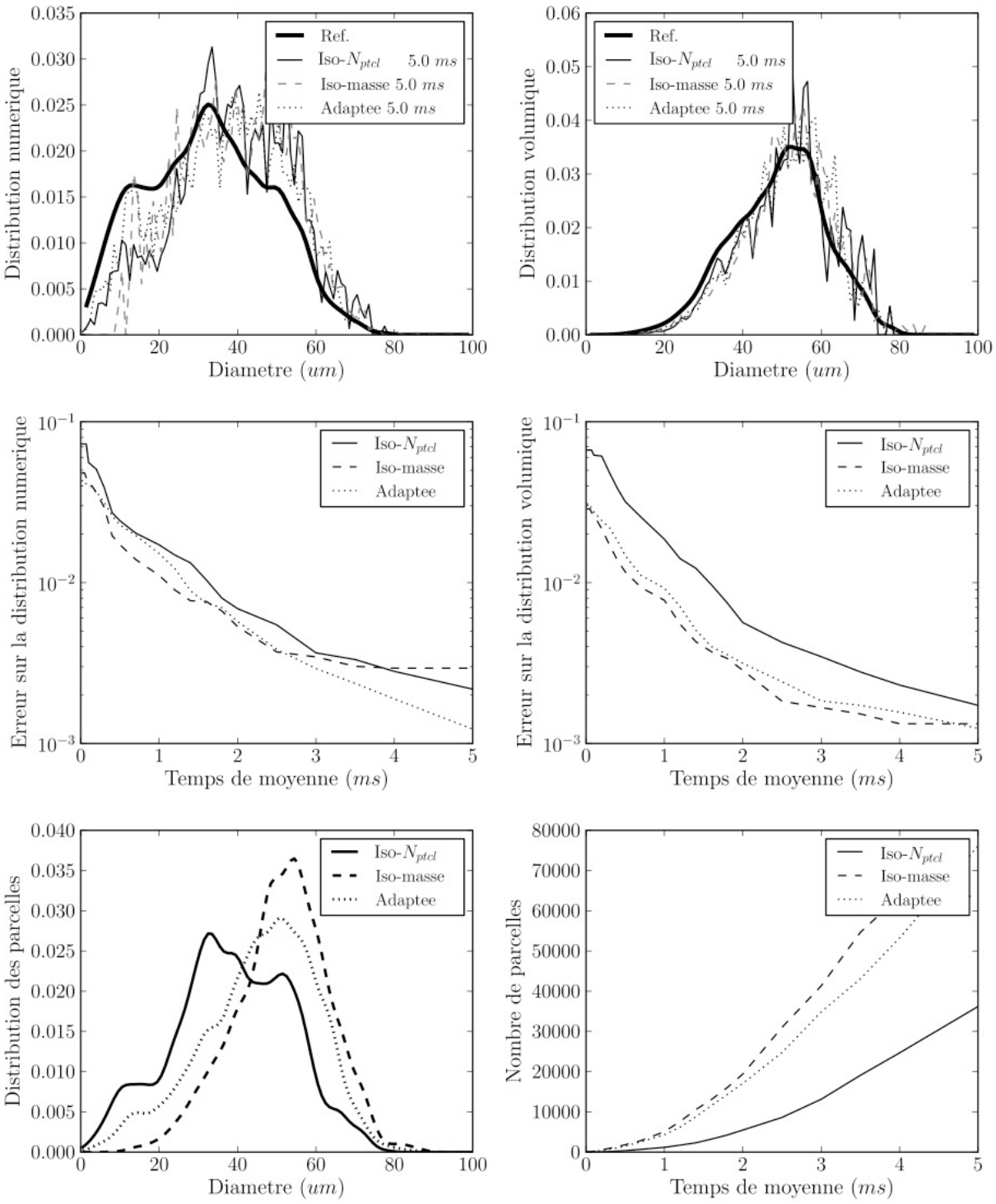

Figure 7.10 : *Population locale dans la boite II (Fig. 7.8) pour les trois méthodes. Dans l'ordre : distribution en nombre, en volume par rapport à la population de référence (16 ms de convergence), erreur sur la distribution en nombre, en volume, distribution des particules numériques et nombre de particules numériques comptées en fonction du temps de moyenne.*

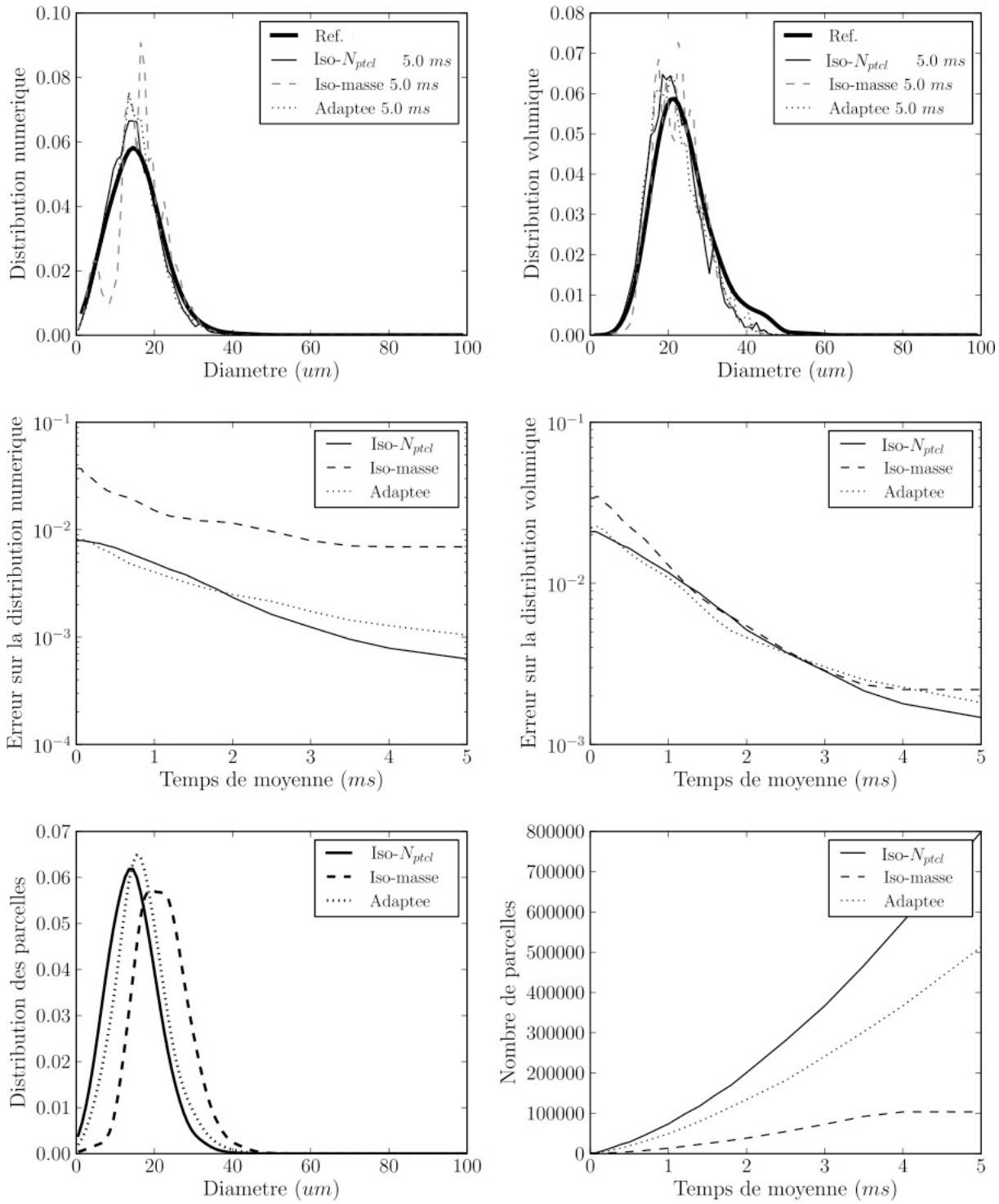

Figure 7.11 : *Population locale dans la boite III (Fig. 7.8) pour les trois méthodes. Dans l'ordre : distribution en nombre, en volume par rapport à la population de référence (16 ms de convergence), erreur sur la distribution en nombre, en volume, distribution des particules numériques et nombre de particules numériques comptées en fonction du temps de moyenne.*

Quatrième partie

Modélisation de la combustion diphasique

Chapitre 8

Modèle de combustion diphasique

Sommaire

8.1 Adaptation of the Thickened Flame model in the presence of droplets 142

8.2 Multi-state Algorithm for Reactive Droplets, *MuStARD* 151

8.2.1 Context of the modeling approach 151

8.2.2 Overlook of MuStARD 152

8.2.3 Density criterion 153

8.2.4 Auto-ignition of an isolated droplet : transition $V \rightarrow E$ 155

8.2.5 Single droplet combustion model for "E" mode 160

8.2.6 Extinction of an isolated burning droplet : transition $E \rightarrow V$ 169

8.3 Summary of the chapter 171

Comme vu au Chap. 2.4.2, la combustion diphasique introduit divers régimes et structures de flamme, allant du spray pré-évaporé à la goutte isolée au spray pré-évaporé (Fig. 2.2). Du point de vue de la modélisation, plus l'interaction spray/combustion est directe, plus il est difficile de décrire les phénomènes physiques associés à cette interaction. Ainsi, la plupart des modèles actuels permettant de simuler une combustion diphasique considèrent le spray comme totalement ou partiellement pré-évaporé, et ignorent l'effet direct de la présence de goutte sur la structure de flamme.

Dans ce chapitre, une modification du modèle de combustion turbulente TFLES pour le cas des gouttes s'évaporant en présence d'une combustion gazeuse est proposée dans un premier temps. Dans un deuxième temps, un modèle avancé de traitement de la combustion diphasique est proposé. Ce modèle, appelé *MuStARD* pour "Multi-State Algorithm for Reactive Droplets", permet d'introduire en particulier la combustion de goutte isolée. Ce chapitre est une retranscription d'un article en cours de soumission à *Combustion & Flame*, en anglais.

8.1 Adaptation of the Thickened Flame model in the presence of droplets

In a regime of full pre-vaporization (Fig. 2.2), no interaction between the liquid and the reaction zone is found, so that spray motion and evaporation can be treated separately from the flame model. In this particular case, no further modeling is needed. However, in current applications, the spray reaches the reaction zone, in which strong evaporation takes place and may pilot partly the local reaction rate. The coupling between the liquid phase that evaporates and the gaseous chemical reaction is thus strong. The TFLES model used for the turbulent combustion needs then to take into account the liquid phase, in order to recover the non-thickened flame front characteristics. In addition, the close liquid-gas interaction occurring at the sub-grid scale in these areas should be well characterized in terms of additional wrinkling of the flame front, local turbulence modification, pollutant emissions, and introduced if needed, through for example a modification of the efficiency function. This is however out of scope of this study but is a current research path that is explored.

The derivation of the the TFLES model for two-phase flames was first made by Boileau *et al.* [22] using again dimensional analysis. It was found that both evaporation and drag should be corrected to recover the unthickened flame structure. However, it was not clear wether this correction was sufficient to treat droplets impinging the flame front not perpendicularly. Moreover, the drag correction was put aside to avoid strong modification of the droplet trajectories.

To adapt TFLES, another derivation approach is proposed in the following. The thickened flame model can be seen as a modification of time (t) and space ($\mathbf{x}$) through the thickening factor :

$$\mathbf{x}^{TFLES} \sim \frac{\mathbf{x}}{F} \tag{8.1}$$

$$t^{TFLES} \sim \frac{t}{F} \tag{8.2}$$

As a consequence, and for consistency, the same scale transform must be applied to the liquid phase. Applying the scale transform of Eqs. 8.1 and 8.2 to the lagrangian derivative $\mathcal{D}/\mathcal{D}t = \partial/\partial t + u_{p,i}\partial/\partial x_i$, and to the lagrangian system governing the evolution of a droplet p (Eqs. 4.2, 4.3 and 4.4), leads to modification of the drag force, the evaporation rate and the heat transfer as :

$$\tau_p^{TFLES} = F\tau_p \tag{8.3}$$

$$\Phi_p^{TFLES} = \frac{\Phi_p}{F} \tag{8.4}$$

$$\dot{m}_p^{TFLES} = \frac{\dot{m}_p}{F} \tag{8.5}$$

This means that, in the thickened space, the droplets are meant to evaporate F times slower than in the physical space, and are subjected to a drag force that is F times lower than the real drag force. By combining the TFLES model to the gaseous equations and the thickening of the

liquid phase phenomena, the un-thickened spray flame behavior is expected to be recovered. This combination leads to a new model called Two-Phase TFLES (TP-TFLES).

TP-TFLES is now validated in a two-phase laminar 1D flame. Two configurations are simulated and presented inTab. 8.1. In the first configuration, the liquid droplets and the gas are injected at the same velocity, so that no relative motion appears before entering the reaction zone. The drag force and its thickening has thus little influence on the result. In the second configuration, droplets are injected twenty times faster than the carrier gas, which is more realistic in the context of gas turbines. In this case, the drag force plays a key role and its thickening has a significant effect. In order to control the liquid velocity at the entrance of the flame, the drag force is disconnected upstream, before entering the pre-heating zone[1]. Moreover, in the "relative motion" case, the droplets are larger, to increase the influence of the evaporation time scale.

The inlet conditions are chosen so that no evaporation occurs before entering the reaction zone. Liquid JP10 droplets are injected with a mixture of air and fuel vapor at temperature 272 K. The gaseous inlet velocity is adapted to match the laminar flame speed, in order to obtain a steady flame. In this section, the global liquid equivalence ratio corresponds to :

$$\Phi_l^{\text{global}} = s\frac{\rho_l \alpha_l u_l}{\rho_g Y_{Ox} u_g} \tag{8.6}$$

where s is the stochiometric mass coefficient, l and g subscripts denote liquid and gaseous variables respectively.

Combining this equivalence ratio with Eq. 2.2, the total equivalence ratio, corresponding to the equivalence ratio of the fully vaporized mixture, can be defined as :

$$\Phi_{\text{tot.}} = \Phi_l^{\text{global}} + \Phi_{\text{gas}} \tag{8.7}$$

This total equivalence ratio can be written as the ratio between two reactant mass flow rates :

$$\Phi_{\text{tot.}} = \frac{\dot{m}_{JP_{10}}}{\dot{m}_{O_2}} = \frac{\rho_l \alpha_l u_l + \rho_g u_g Y_{JP_{10}}}{\rho_g u_g Y_{O_2}} \tag{8.8}$$

For each case, three simulation are compared :
– **Reference**, which corresponds to the reference unthickened two-phase flame,
– **TFLES model**, where only the gaseous set of equations are modified,
– **TP-TFLES**, where both gas and liquid phase are thickened.

Results for the equilibrium case are displayed in Figs. 8.1, 8.3 and 8.2. In this particular case, to compare results with the reference solution, all thickened solutions are rescaled spatially to match the physical domain and are shifted so that the maximum heat release corresponds to $x = 0$. The maximum thickening factor is chosen to be $F = 5$ in the reaction zone, and is triggered by the thickening sensor, so that no thickening is applied outside the flame front (Sect. 3.4.3).

1. i.e. where the gaseous temperature starts increasing.

Tableau 8.1 : *Inlet conditions for the two-phase laminar 1D flame cases.*

	Equilibrium	Relative convection
Gaseous temperature	272 K	272 K
Liquid temperature	272 K	272 K
Presure	$1.177^5\ Pa$	$1.177^5\ Pa$
Initial diameter	25 μm	50 μm
Gas velocity	0.12 m/s	0.05 m/s
Liquid velocity	0.12 m/s	2 m/s
Fuel mass fraction	$2.175e^{-3}$	$2.175e^{-3}$
Gaseous equivalence ratio	0.03	0.03
Liquid equivalence ratio	0.57	0.87
Total equivalence ratio	0.6	0.9

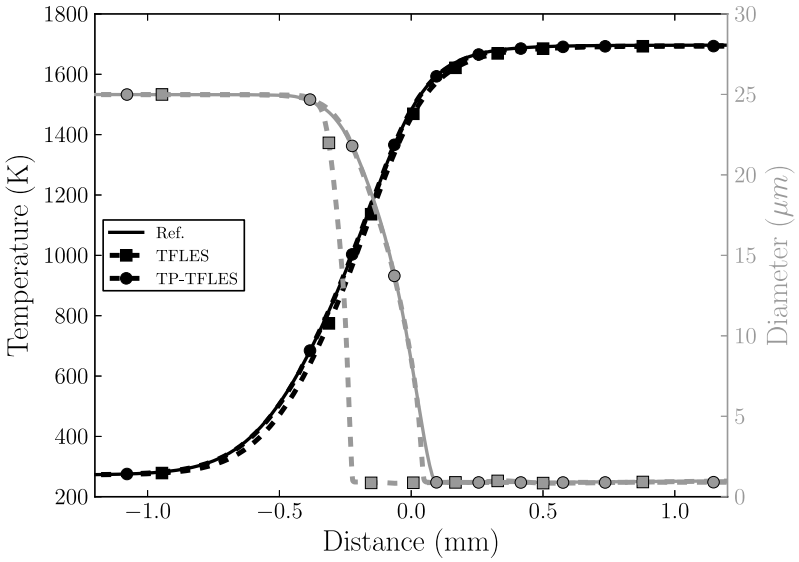

Figure 8.1 : *Equilibrium case : gaseous temperature (left) and droplet diameter (right).*

Temperature profiles are very similar for the three approaches (Fig. 8.1). Thickening has however a strong effect on the diameter, when the evaporation rate is not divided by the thickening factor (Fig. 8.2), and droplets evaporate faster than in the reference solution (Fig. 8.1). The TP-TFLES approach recovers the correct evolution of the diameter. In this particular case, the evaporation rate is strong before entering the flame front, due to the size of droplets that are relatively small (Fig. 8.2). In the three simulations, the reaction rate occurs downstream the main evaporation zone, and is very similar. In Fig. 8.3, it is seen that, as soon as the thickening is triggered in the TFLES approach, the droplet velocity profile relaxes faster towards the gaseous velocity, which increases in the flame front. Once again, TP-TPFLES recovers the reference evolution of the droplet

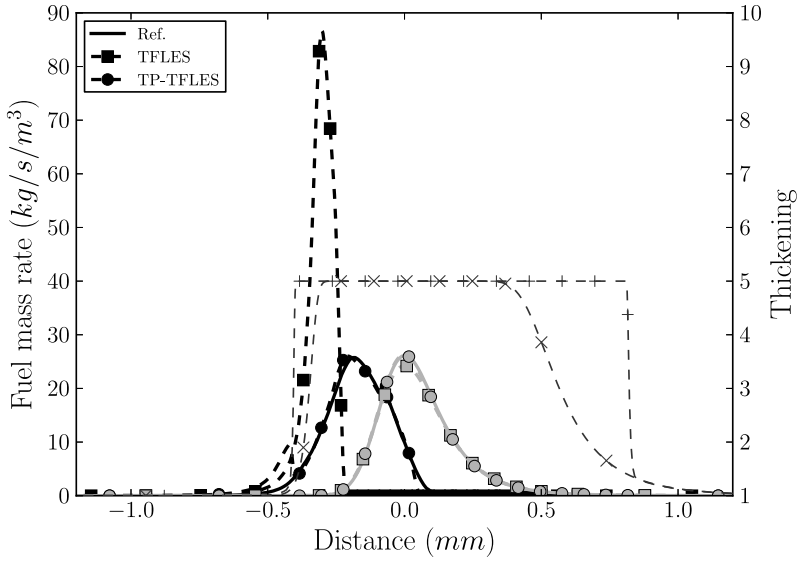

Figure 8.2 : *Equilibrium case : Fuel mass production (evaporation, black) and consumption (combustion,grey) rates (left), and thickening function (right).*

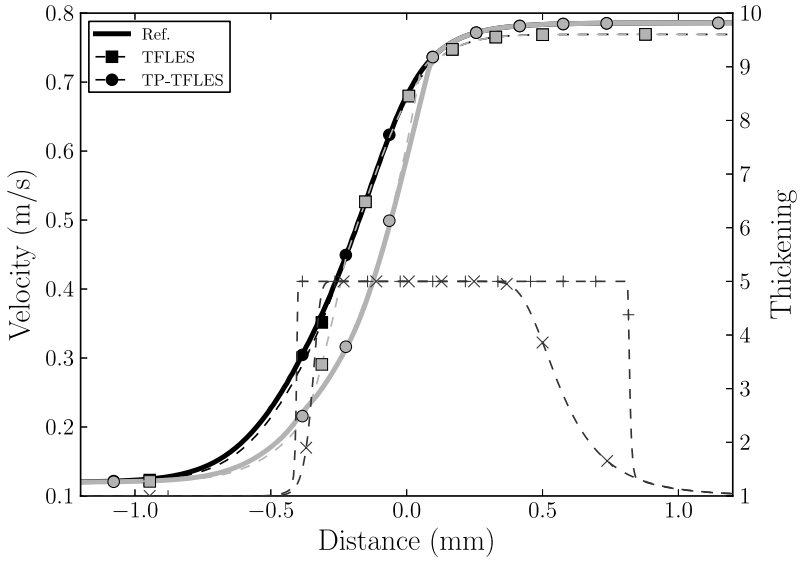

Figure 8.3 : *Equilibrium case : gaseous (black) and liquid (grey) velocities (left axis), and thickening function (right axis).*

velocity. Reacting species profiles are displayed in Fig. 8.4. Only a slight difference in the TFLES fuel mass fraction profiles can be observed, due to the stronger evaporation rate, not limited by F compared to TP-TFLES. Last, reactant mass flow rates (Eq. 8.8) are displayed in Fig. 8.5, along

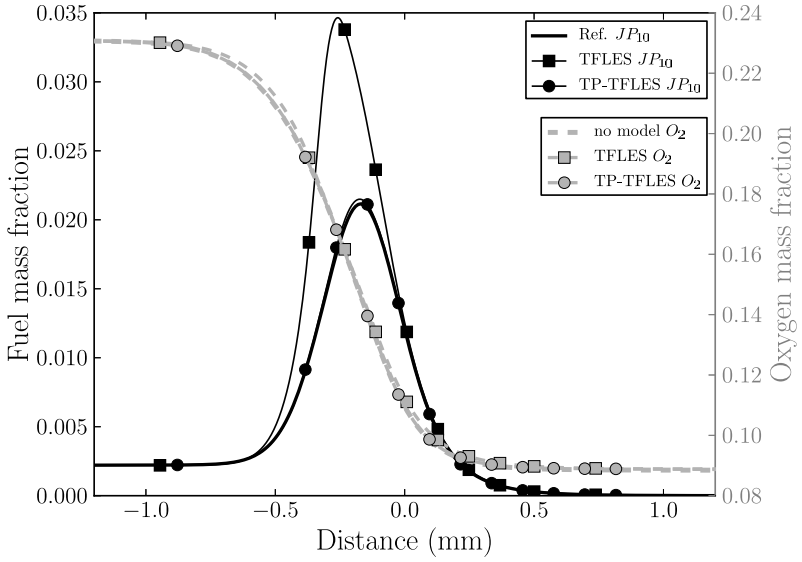

Figure 8.4 : *Equilibrium case : Fuel (black) and oxygen (grey) mass fractions.*

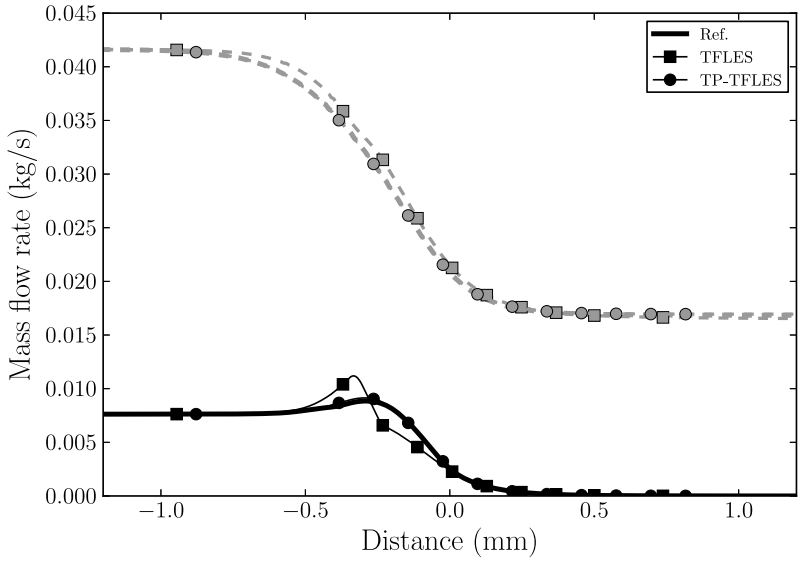

Figure 8.5 : *Equilibrium case : reactant mass flow rates (Eq. 8.8, $\dot{m}_{JP_{10}}$ in black, $\dot{m}_{O_2}$ in grey).*

with the global equivalence ratio(Fig. 8.5), evaluated at each point (Eq. 8.7). Note that the global equivalence ratio, initially at 0.6, increases in front of the reaction zone to nearly 1, due to the relative motion between the carrier gas and the liquid that is evaporating.

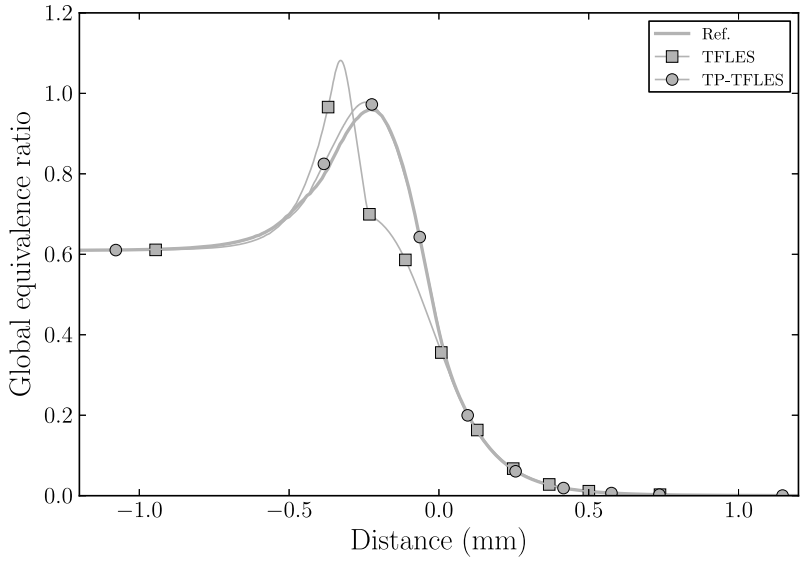

Figure 8.6 : *Equilibrium case : global equivalence ratio (Eq. 8.7).*

In this case, it is seen that the results are globally similar, as observed in previous works [22, 182]. However, results are different for a more realistic case, where a relative motion exists between the gas and the droplets.

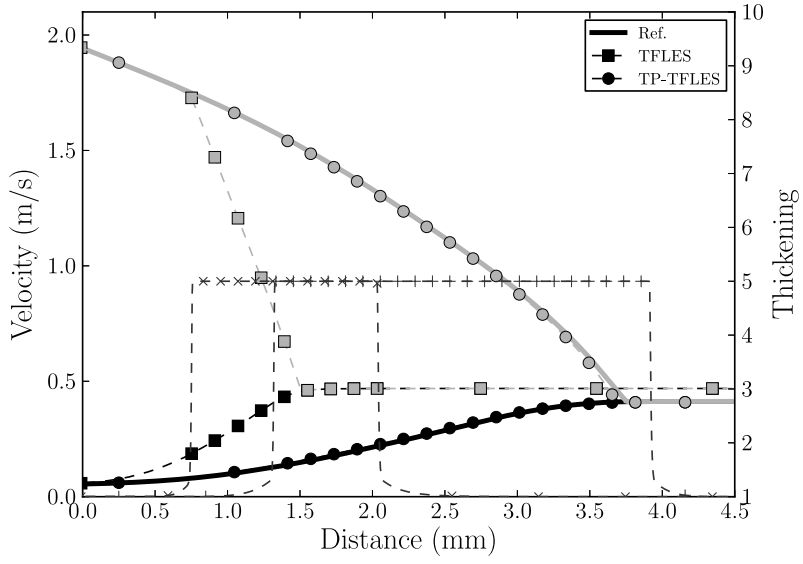

Figure 8.7 : *Relative motion case : gaseous (black) and liquid (grey) velocities (left axis), and thickening function (right axis).*

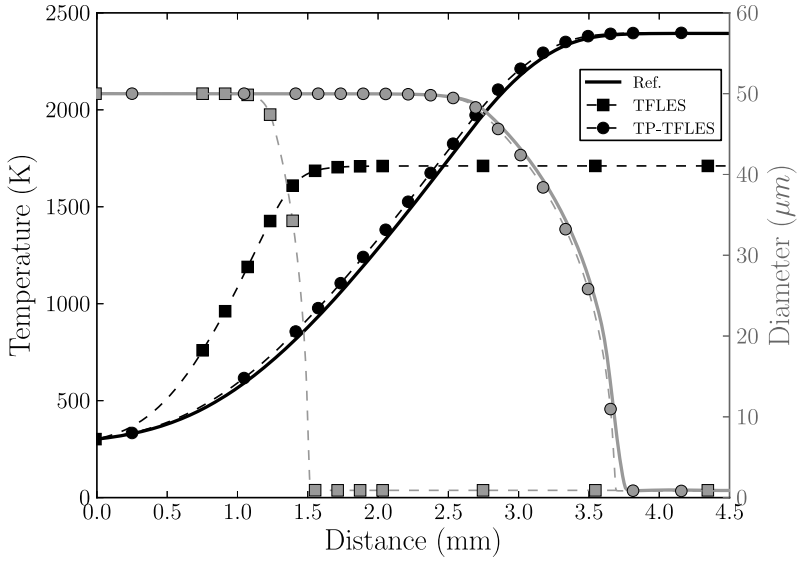

Figure 8.8 : *Relative motion case : gaseous temperature (left) and droplet diameter (right).*

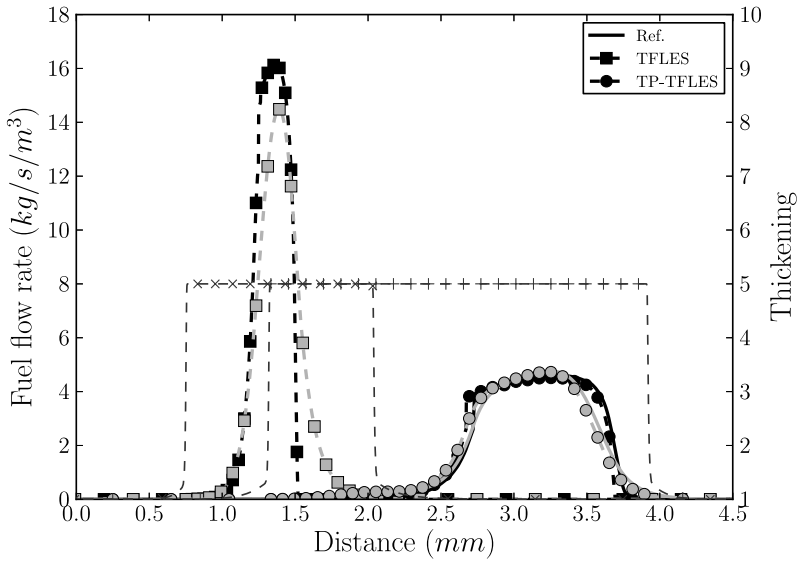

Figure 8.9 : *Relative motion case : Fuel mass production (evaporation, black) and consumption (combustion,grey) rates (left), and thickening function (right).*

Results for the relative motion case are displayed in Figs. 8.8, 8.7, 8.9, 8.10, 8.11 and 8.12. Here, strong differences can be observed between the TFLES approach and the reference solution. In particular, the TFLES flame is not stationary but moves upstream with a speed of about 2.25 cm/s. Therefore, in this particular case, to compare results with the reference solution, all

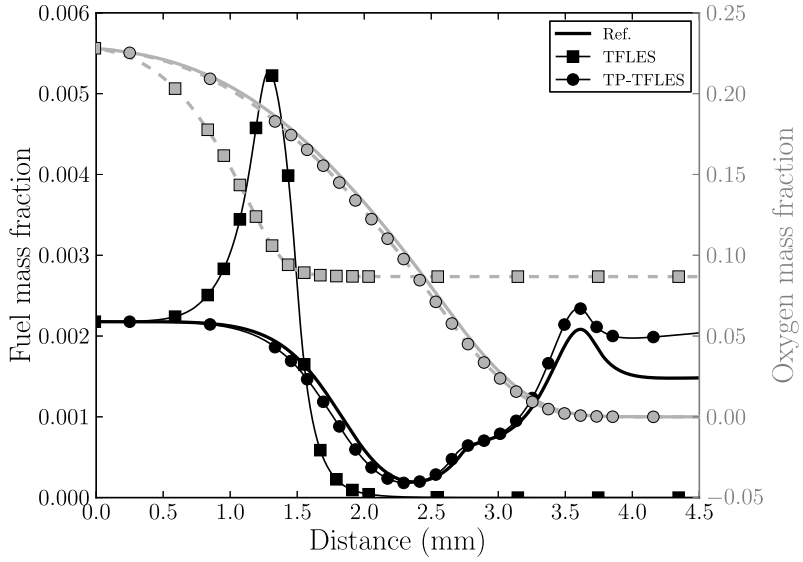

Figure 8.10 : *Relative motion case : Fuel (black) and oxygen (grey) mass fractions.*

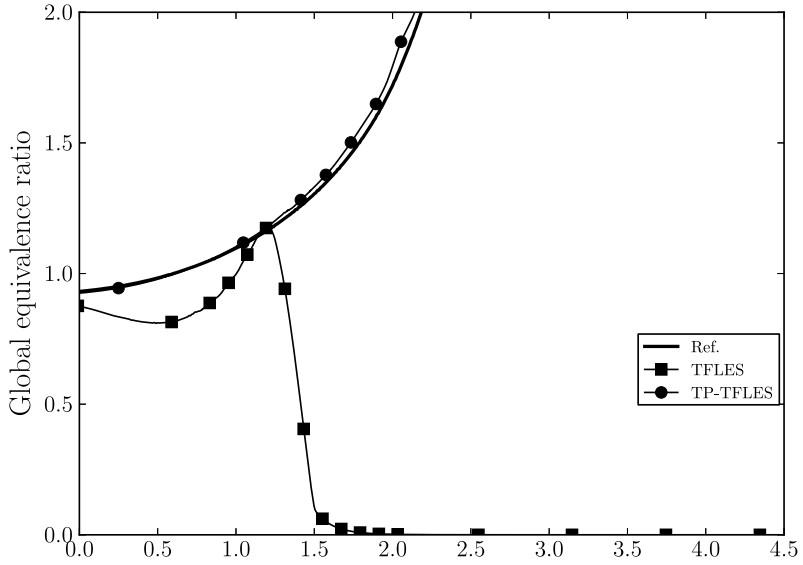

Figure 8.11 : *Relative motion case : reactant mass flow rates (Eq. 8.8, $\dot{m}_{JP_{10}}$ in black, $\dot{m}_{O_2}$ in grey).*

thickened solutions are also rescaled spatially to match the physical domain, and are shifted so that $x = 0$ corresponds to the beginning of the preheating zone (at the point where the drag force is triggered). In Fig. 8.8, it is observed that the final flame temperature is smaller in the TFLES case than in the reference solution, as well as the final oxygen mass fraction (Fig. 8.10), which shows that the two simulated flames (TFLES and reference) are operating at a different equivalence ratio.

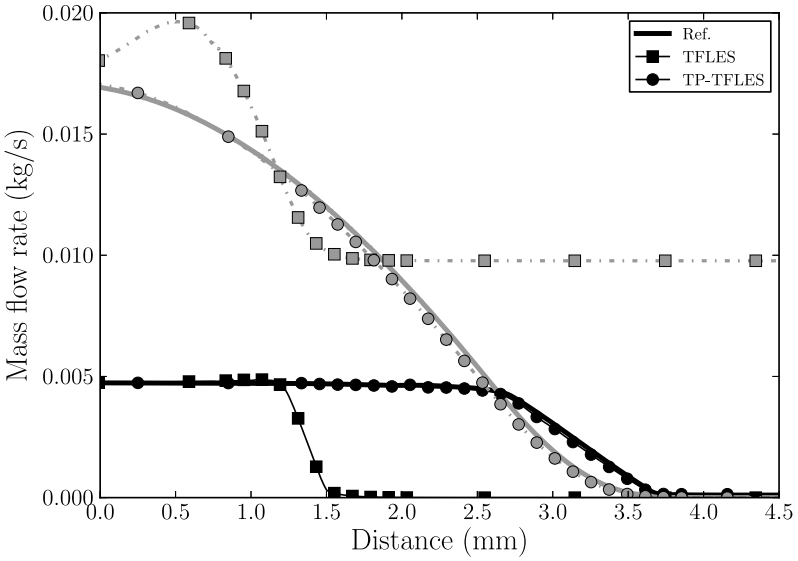

Figure 8.12 : *Relative motion case : global equivalence ratio (Eq. 8.7).*

In Fig. 8.7, it is observed that the TFLES velocity profiles are very different. In fact, the large relative motion between droplets and gas, at the inlet, generates a strong drag force. In TFLES, the uncorrected drag triggers a rapid relaxation of liquid velocity towards the gaseous velocity, which is very different than the reference solution. When looking at the flame structure (Fig. 8.2), it is seen in both cases that the production rate through evaporation is of the same order than the consumption rate due to combustion : combustion is thus piloted by evaporation. However the TFLES preheating zone is shorter, and evaporation and reaction rates are more intense than in the reference solution, which is due to the non-corrected evaporation rate. The global equivalence ratio (Fig. 8.11) decreases largely in the TFLES reaction, whereas it is maintained in the reference solution. Therefore, the reference flame burns at a higher equivalence ratio than the TFLES flame. The global equivalence ratio that is actually burnt in these flames can be obtained using two methods. First, it can be obtained by looking at the final state in the burnt gas region. Second, it can be obtained by rescaling precisely each mass flow rates in the flame front referential, so as to consider the flame stationary (for the TFLES cases, velocities have to corrected of 0.03 m/s. These two methods give similar results : the reference flame burns at a global equivalence ratio of 1.05, which leads to an adiabatic flame temperature of 2380 K, and TFLES flame burns at 0.61, which leads to an adiabatic flame temperature of 1720 K. Flame structures are thus very different, if the TP-TFLES correction is not introduced.

Indeed, TP-TFLES recovers accurately the reference behavior : the flame is stationnary in the domain, and velocities, temperature and diameter evolutions are all well captured. This more complex case shows the necessity of using the TP-TFLES correction to recover the un-thickened flame behavior when using the TFLES model.

8.2 Multi-state Algorithm for Reactive Droplets, MuStARD

8.2.1 Context of the modeling approach

As shown in Chap. 2, the interaction between the spray, the combustion and the turbulence can be tremendously complex and implies a large variety of scales. In the case of a heterogeneous two-phase combustion (Fig. 2.2 c.), the presence of the spray in the reaction zone can strongly modify the local flame structure, in particular by generating group combustion of droplets and single droplet combustion.

Single droplet combustion is a phenomenon typically occurring at the droplet scale. To capture this flame structure numerically, the mesh refinement of the gaseous phase around the point-source droplet should thus be at least of the order of the droplet size. If the mesh is not fine enough and the classical evaporation model is used in a case where the droplet should burn individually, the lack of spatial resolution generates a gaussian-shape peak of fuel vapor and heat release, centered on the droplet, as sketched in Fig. 8.13. This behavior fails to reproduce the single burning combustion because the evaporation rate is largely underpredicted, as well as the local heat release generated by the single droplet (Fig. 8.13 right). However, refining the mesh around the point-source evaporating droplet has two major drawbacks. First, it is very costly in terms of CPU because current it implies cells one or two orders of magnitude smaller than current industrial meshes. Second, it is in contradiction with the point-source assumption, stating that the size of the droplet should be at least one order of magnitude smaller than the mesh size [168]. As seen in Chapter 6, if this assumption is not verified, important errors may arise.

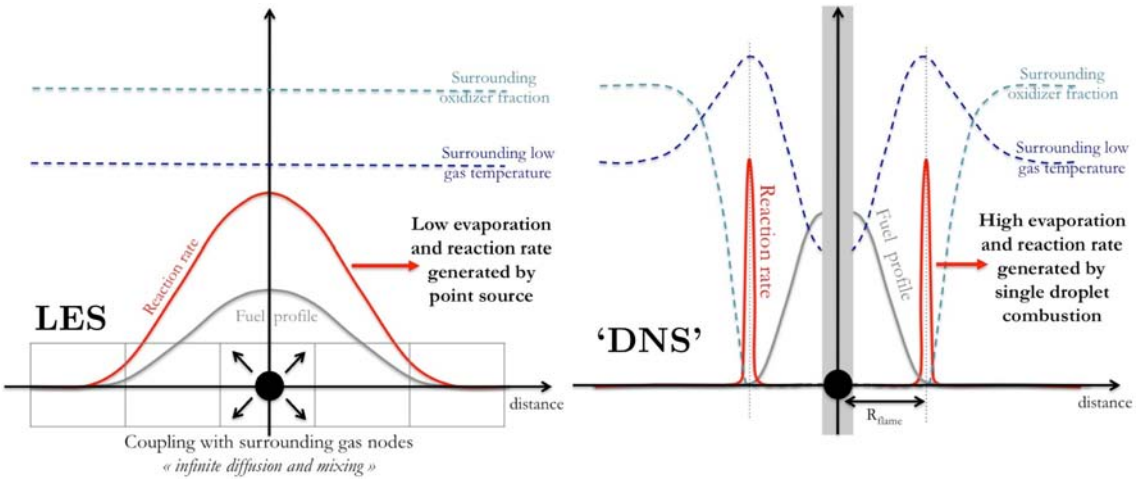

Figure 8.13 : *Combustion around an evaporating droplet using the classical evaporation model on a LES mesh (left) compared to the real physical situation of a single droplet combustion.*

It is therefore not possible to get a resolved single droplet combustion in the LES - DPS context. Instead, a macroscopic model for a single isolated droplet is used to describe correctly the behaviors

that occur very locally around the droplet and the link with the gaseous phase. This approach was already attempted in several studies, which are briefly presented in the following.

Huang *et al.* [45, 100] designed a multi-state droplet model from an extensive DNS database of isolated single burning droplets. The DNS results highlighted three possible regimes for a reacting isolated droplet in a convecting flow. The first mode corresponds to evaporation alone, for which no combustion occurs around the droplet. The evaporation rate is found to increase with the relative convection intensity. The second mode corresponds to an envelope mode, for which a spherical flame stabilizes around the droplet, corresponding to the single droplet combustion mode. The evaporation rate is found to be more intense than for the non-reacting droplet. The third mode corresponds to a wake-flame mode, in which the relative convection is sufficiently strong to push the flame in the wake of the droplet. The evaporation rate is found to be very similar to the non-reacting evaporation rate because the wake flame does not particularly enhance the mass transfer rate at the surface of the droplet as in the envelope mode.

Huang *et al.* converted the DNS results into four different correlated criteria of mode transition : ignition, extinction, blow-off (transition from envelope to wake flame) and reattachment (transition from wake to envelope flame). They constructed a multi-state droplet algorithm to be used in CFD solvers, which they briefly analyzed *a posteriori* on a very simple jet configuration [100]. This multi-state droplet algorithm was however not applied to a complex geometry, with full retro-action on the gas phase. Moreover, the validity of the criterion is restricted to the DNS cases that served for the correlations, which limits the range of application in an industrial CFD context.

Recently, Wang *et al.* [214] proposed a model for single droplet combustion, taking into account the transition from non-reacting to single burning droplets, and applied it to a simple geometry, with two-way coupling between the gas and the liquid phases. Their results showed that taking into account single droplet combustion changed the simulated flame structure and liquid fuel distribution. However, their transition criterion and associated single droplet combustion model are over-simplified to consider an extension of the approach to the industrial CFD context.

The aim of the following study is to propose an original multi-state droplet combustion algorithm, called *MuStARD* for Multi-State Algorithm for Reactive Droplets, based on existing knowledge of spray and droplet combustion, suitable for industrial applications, in terms of complexity and range of conditions. Particular attention was taken to validate the model throughout its derivation, on a wide range of operating conditions, using available experimental and DNS results.

8.2.2 Overlook of MuStARD

Following previous approaches, spray combustion is introduced in the Lagrangian simulation by giving a particular state to each physical droplets, which can take the following behavior : a classical single evaporation state and two reacting states (envelope flame and wake flame modes).

Single evaporation occurs when the thermodynamical conditions surrounding the droplet are not sufficient to trigger a chemical reaction. In this case, the classical Abramzon-Sirignano evaporation model [1] is applied to capture the temporal evolution of the droplet.

If the thermodynamic conditions surrounding the droplet allow combustion to occur locally around the droplet, the single evaporation model is not sufficient to treat the evolution of the droplet and its coupling with the gaseous phase, and must be modified to take into account this local combustion. In this case, two particular regimes for a single droplet can be obtained : envelope or wake flame. In the present work, only the "envelope flame" regime is considered in a first approach, because in this case the evaporation and combustion rates are strongly modified compared to the classical non-reacting droplet evaporation. The "wake flame" case is not specifically considered because the vaporization rate, in this case, is only slightly different from the classical non-reacting evaporation rate[45]. To treat the "envelope flame" regime, a single droplet combustion model is derived in Sect. 8.2.5.

The *MuStARD* algorithm is schematized in Fig. 8.14. It contains several criteria to determine from the surrounding gaseous conditions and droplet condition, in which state each individual droplet should be treated. Each element of this algorithm is detailed in the following. The density criterion insures that the spray is diluted enough to enable single droplet combustion. The droplet auto-ignition criterion checks if the droplet auto-ignites. The extinction criterion verifies if the droplet can sustain single droplet combustion. At the end of this treatment, if the droplet is in a vaporizing mode 'V', the classical single evaporation model is applied (Sect. 4.2). If in the enveloppe 'E' mode, the single droplet combustion model, detailed in Sect. 8.2.5, is applied.

8.2.3 Density criterion

Following the analytical approach of Kerstein *et al.* [114] or Umemura *et al.* [207], it is found that a flame can not penetrate and trigger individual burning modes in a droplet mist if it is too dense. In the case of a dense spray, the flame, if present, stands outside the mist and is fed by the fuel vapor emitted by the spray. In these particular areas, the single droplet combustion behavior should not be triggered.

To do so, a density criterion is derived following the percolation theory of Kerstein *et al.* [114]. In the percolation theory, the flame evolves group combustion when the inter-droplet spacing S is insufficient to contain a flame (Fig. 8.15). The criterion can be expressed as : "If the inter droplet spacing S is smaller than the envelope flame diameter d_f, then the spray is too dense to obtain the E mode". The flame diameter d_f is easily evaluated for a single burning droplet using equation 8.22. On the contrary, in the Lagrangian framework, the local inter-droplet spacing is not readily available. Indeed, point-source droplets are isolated and do not see each other. Calculating the inter-droplet spacing for each droplet by looking at closest neighbors would be clearly too costly in the scope of industrial CFD. However, an estimation of the inter-droplet spacing can be obtained

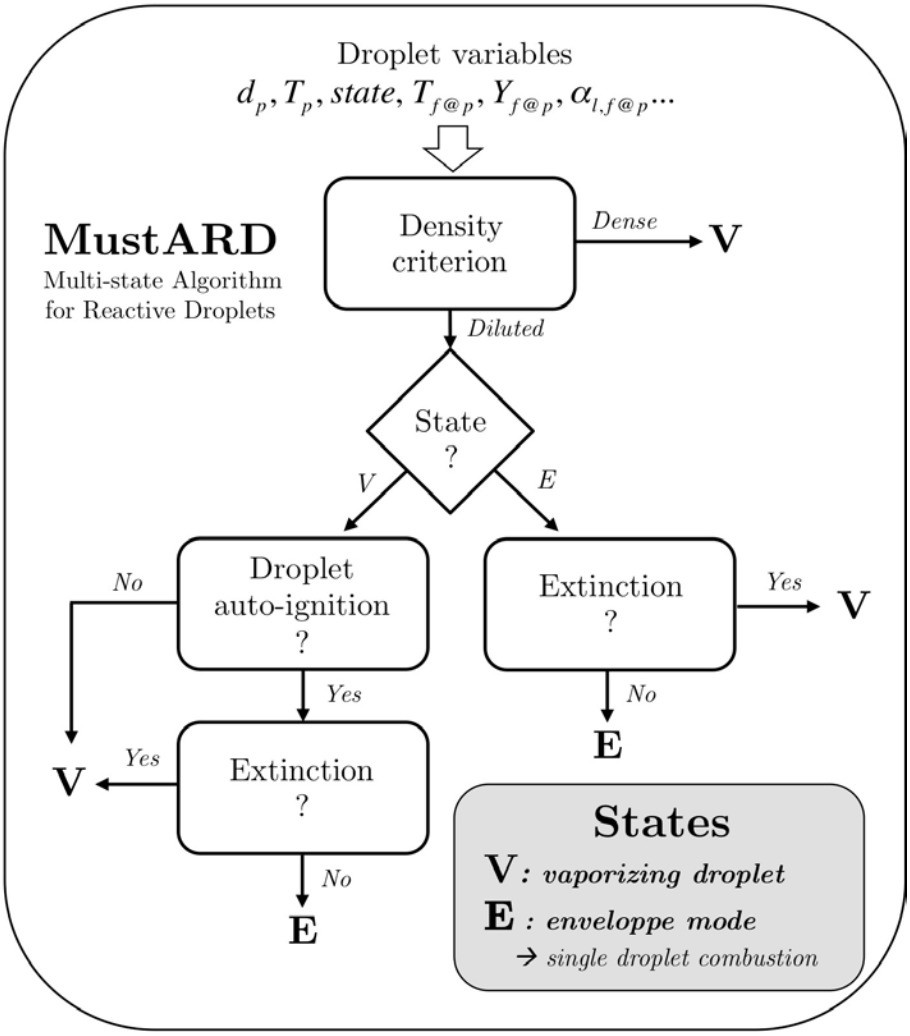

Figure 8.14 : *Scheme of the proposed multi-state droplet combustion algorithm, MuStARD.*

from the local liquid volume fraction α_l (Eq. 1.1) at the droplet location. The local liquid volume fraction is obtained by calculating the Eulerian field of liquid volume fraction (interpolation of droplet volumes on the gaseous nodes) and interpolating it back at the droplet location. This two-way interpolation acts as a first-order filtering operation. The liquid volume fraction at the location of the droplet is then used to obtain the inter droplet-spacing [51] using the following relationship :

$$S \sim \sqrt[3]{\frac{\pi}{6\alpha_l}} d_p \tag{8.9}$$

The density criterion is checked for each droplet, at the first step of the *MuStARD* algorithm (Fig. 8.14).

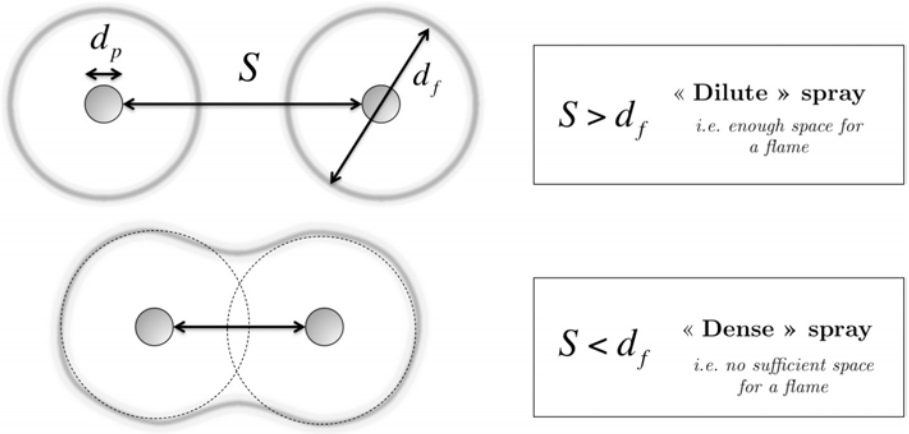

Figure 8.15 : *Density criterion.*

8.2.4 Auto-ignition of an isolated droplet : transition V → E

If S is sufficiently large to allow the E mode, a criterion is needed to determine if a flame effectively ignites. The auto-ignition of a single droplet is a phenomenon that is studied extensively in the literature, in particular for safety reasons, fuel characterization, or Diesel engine design. This literature was reviewed by Aggarwal [3]. Recently, Chen *et al.* [39] proposed a simple semi-analytical model giving the auto-ignition delay of a single droplet embedded in a hot oxidizing environment, with good accuracy when compared to experiment. Moreover, their method is particularly suitable for CFD because of its simplicity and low CPU cost. In this work, the model is extended to integrate history effects, in order to be used in unsteady droplet surrounding mixtures. The model is detailed in the following.

Following the unsteady droplet evaporation model proposed by Law *et al.* [124], quasi-steady gaseous temperature and species profiles establishing around an isolated non-burning droplet are evaluated as :

$$C_P(T)T(x) = C_P(T_p)T_p + L_v\left[\exp\left(\frac{\dot{m}_p}{4\pi r_p \lambda/C_P}(x-1)\right) - 1\right] \tag{8.10}$$

$$Y_F(x) = 1 + (Y_F^\infty - 1)\exp\left(\frac{\dot{m}_p}{4\pi r_p \rho \mathcal{D}}(x_\infty - x)\right) \tag{8.11}$$

where C_P is the heat capacity, L_v is the latent heat of vaporization, $\dot{m}_p$ is the evaporation rate, r_p is the droplet radius, $\mathcal{D}$ is the mixture diffusion coefficient and λ the thermal diffusion [2]. The coordinate is $x = 1/r$, with r the radial distance from the center of the droplet, and r_∞ is the distance from the droplet center of the propagating fuel diffusion front (initially, $r_\infty = r_p$), which is define as the position where conditions are equal to infinite conditions, and is unknown.

2. both evaluated using the third law assumption (Sect. 4.2.2.2.5).

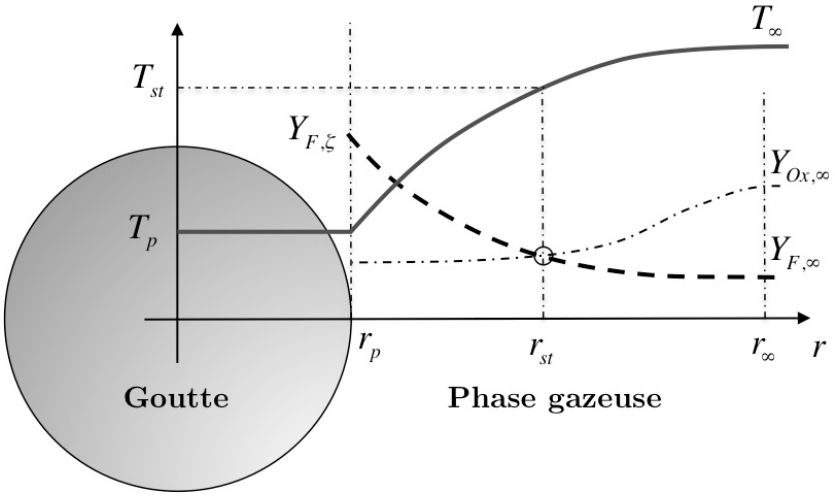

Figure 8.16 : *Position of the stoichiometric mixture around the droplet.*

By integrating and manipulating these two equations, it is possible to obtain the gaseous temperature at the stoichiometric mixture location (Fig. 8.16) :

$$C_P(T_{st})T_{st} = C_P(T_p)T_p + L_v \left[\left(\frac{C_P(T_\infty)T_\infty - C_P(T_p)T_p}{L_v} + 1 \right) \left(\frac{Y_F^{st} - 1}{Y_F^\infty - 1} \right)^{1/\mathcal{L}e_F} - 1 \right] \tag{8.12}$$

where $Y_F^{st} = [Y_O^\infty/s]/[Y_O^\infty/s + 1 - Y_F^\infty]$ and $\mathcal{L}e_F = \mathcal{S}c_F/\mathcal{P}r = \lambda/(\rho_g C_P \mathcal{D})$. It is seen that the temperature of the stoichiometric point is a function of the temperature of the droplet T_p, and the conditions at infinity, i.e. beyond the fuel front diffusing away from the surface of the droplet. When a cold droplet is placed in a hot oxidizing environment, the temperature of the droplet T_p increases progressively, so that T_{st} increases monotonously with time.

Chen *et al.* [39] evaluate the chemical auto-ignition delay of this stoichiometric mixture, which can be obtained through experimental measurements or detailed chemistry calculation of perfectly premixed mixtures at constant pressure. Then, Eq. 8.12 is evaluated by simulating the evolution of an evaporating droplet (Fig. 8.17). Finally, according to Chen et al. [39], the auto-ignition of the droplet τ_{delay} is obtained by taking the minimum of $t + \tau_{chem}\left(T_{st}(t)\right)$, as illustrated in Fig. 8.17.

In this model, the mixture conditions at infinity are considered steady in terms of composition and temperature, which typically corresponds to a steady droplet in a uniform environment, as in single droplet experiments [68]. However, in a combustion chamber, the droplet surrounding conditions vary a lot, due to mixing and combustion. To integrate unsteady effects into the above auto-ignition model, a Livengood-Wu index is built as [133] :

$$I_{LW}(t) = \int_0^t \frac{1}{\tau_{chem}(T_{st}(t))} dt \tag{8.13}$$

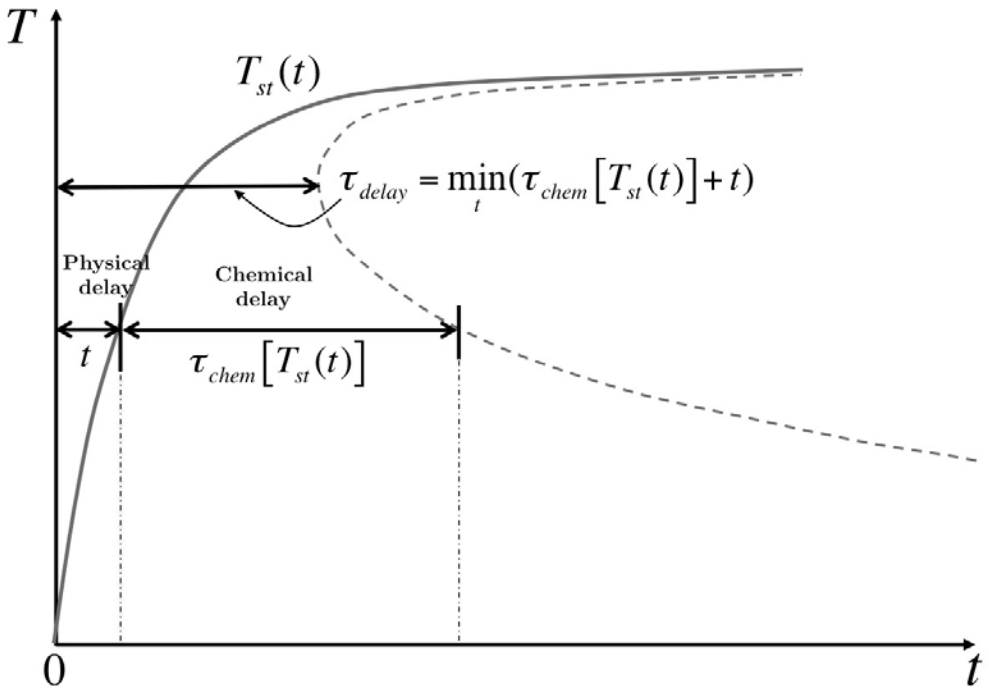

Figure 8.17 : *Evolution of the temperature at the stoichiometric point, for a droplet in a steady environment. The auto-ignition delay of the stoichiometric mixture τ_{chem} is computed for each $T_{st}(t)$. the auto-ignition delay of the droplet corresponds to the minimum of $t + \tau_{chem}(T_{st}(t))$.*

This indicator is zero for $t = 0$, and monotonously increases with time. The mixture is supposed to auto-ignite when the integral reaches unity. If $\tau_{chem}(T_{st})$ is constant, $I_{LW}(t) = 1$ is reached at $t = \tau_{chem}(T_{st})$. Now, if this temperature varies, τ_{chem} varies, and the integral I_{LW} accumulates successive contributions of auto-ignition delays that are met during the droplet time evolution, leading to a global auto-ignition delay of the droplet when $I_{LW}(t) = 1$ is reached, such as illustrated in Fig. 8.18.

The ignition delay time of the stochiometric mixture $\tau_{chem}(T_{st})$ is obtained through a detailed chemistry calculation using the pressure-constant reactor model from the CANTERA package [58]. For n-heptane and iso-octane, the detailed scheme proposed by Jerzembeck *et al.* [106] is used to tabulate the ignition delay for temperatures ranging from 500 to 2500 K and pressures ranging from 0.5 to 20 bars. The ignition delay table is implemented into the solver and used with a bilinear interpolation to compute the ignition delay for any values of T and P. Note that for these two fuels, a marked Negative Temperature Coefficient zone (NTC zone) is observed in the range 600 to 900 K.

The droplet auto-ignition model is now validated using available databases. The droplet auto-ignition delay time is shown along with an evaluation of the droplet total lifetime, obtained by a numerical 0D simulation of the droplet evolution which uses the classical evaporation model (Chap. 4.2.2.1) when the droplet is vaporizing, and the single droplet combustion model (Sect. 8.2.5) as

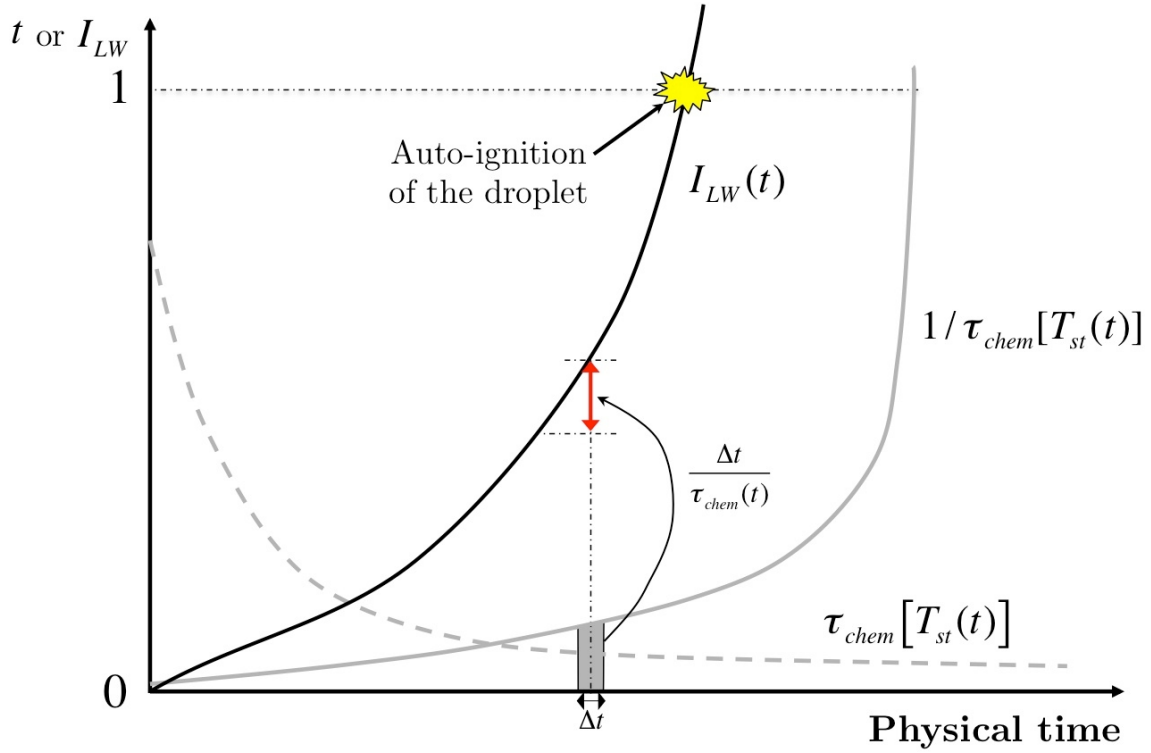

Figure 8.18 : *Example of the evolution of the Livengood-Wu index $I_{LW}(t)$ for a droplet experiencing an increasing ramp of ambient temperature. The auto-ignition delay of the stoichiometric mixture is decreasing exponentially as temperature rises linearly. By cumulating the successive auto-ignition delays, the index increases monotonously from 0 to 1, at which the droplet is considered to auto-ignite.*

soon as $I_{LW}(t) = 1$ is reached. If the droplet auto-ignition delay is of the order of the droplet lifetime, even a small error in its evaluation will have a strong impact on the predicted droplet state and lifetime. However, if it is less than the droplet lifetime by one one odder of magnitude, even an error of 100% will have a very small impact on the predicted lifetime of the droplet.

First, a comparison with an auto-ignition experiment from Faeth *et al.* [68] for a 1.3 mm n-heptane droplet at atmospheric pressure is displayed in Fig. 8.19. The agreement is good in the range [900,1050]K, where auto-ignition occurs at 10 to 20 % of the lifetime of the droplet. The maximum error between the model and the experiment is 5 % at the lowest temperature, and it decreases very rapidly with the temperature. Note that under 900 K, the NTC zone is reproduced : the droplet auto-ignition delay decreases with decreasing temperature.

Second, a comparison with results from an axi-symetric DNS of a single droplet using detailed chemistry, from Stauch *et al.* [197, 198], is displayed for n-heptane and iso-octane in Fig. 8.20. The auto-ignition delay is well reproduced in the range $[1000, 1800]\,K$ for n-heptane at 7 bars. A large difference is observed for both n-heptane and iso-octane at 8 bars on this log-scale figure : the slope of the experiment is two times smaller than in the simulation. However, when comparing

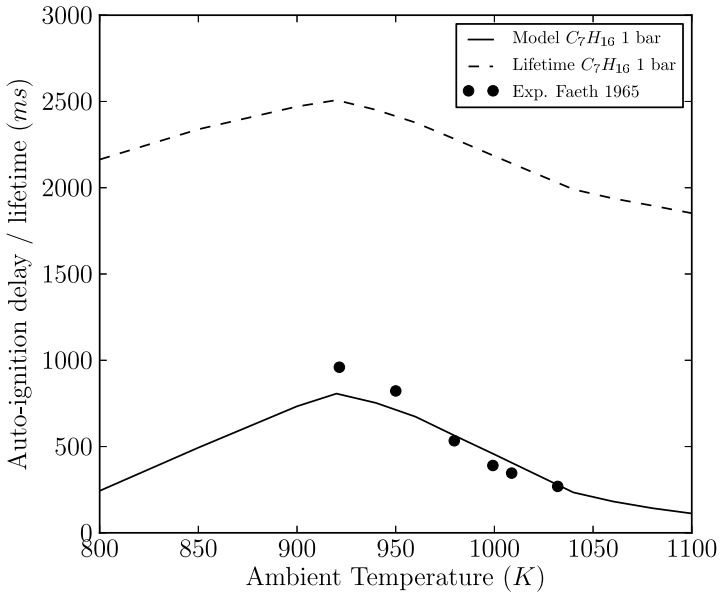

Figure 8.19 : *Comparison of the droplet auto-ignition model against experiments from Faeth et al. [68] for a 1.3 mm-diameter n-heptane droplet at atmospheric pressure. The lifetime of an evaporating droplet at the same temperature is also displayed for comparison.*

this error of maximum 5 ms to the actual total lifetime of about 100 ms, it can be considered acceptable as it will not induce a strong error on the burning droplet.

Below 1000 K, the iso-octane results capture well the large increase of the auto-ignition delay, which becomes non-negligible compared to the lifetime of the droplet. The n-heptane results largely underestimate the auto-ignition delay obtained with the DNS. Note that the stoichiometric temperature T_{st} in this range of ambient temperature lies in the NTC zone in the range [600,900] K, which seems not to be captured by the DNS. To understand this specific behavior of n-heptane droplets, Yang *et al.* [227] specifically studied n-heptane droplets igniting in the NTC zone using DNS and found the main mechanisms explaining why auto-ignition experiments of a n-heptane droplets do not feature any NTC zone. These mechanisms, too long to be detailed here, are intrinsically unsteady and in part due to detailed chemistry effects. However, the droplet auto-ignition model is essentially based on a quasi-steady assumption, which fails to capture the subtleties of the phenomena in the NTC zone. The ignition criterion validity is thus not completely demonstrated for temperature below 1000 K, especially for fuels with a marked NTC behavior. Further improvements of the criterion should be undertaken to ensure an accurate prediction of the autoignition delay, when it becomes not negligible compared to the lifetime of the droplet. Still for droplets subjected to temperatures over 1000 K, which is mostly the case in the target application, the criterion behaves well enough to give a good prediction of the droplet auto-ignition.

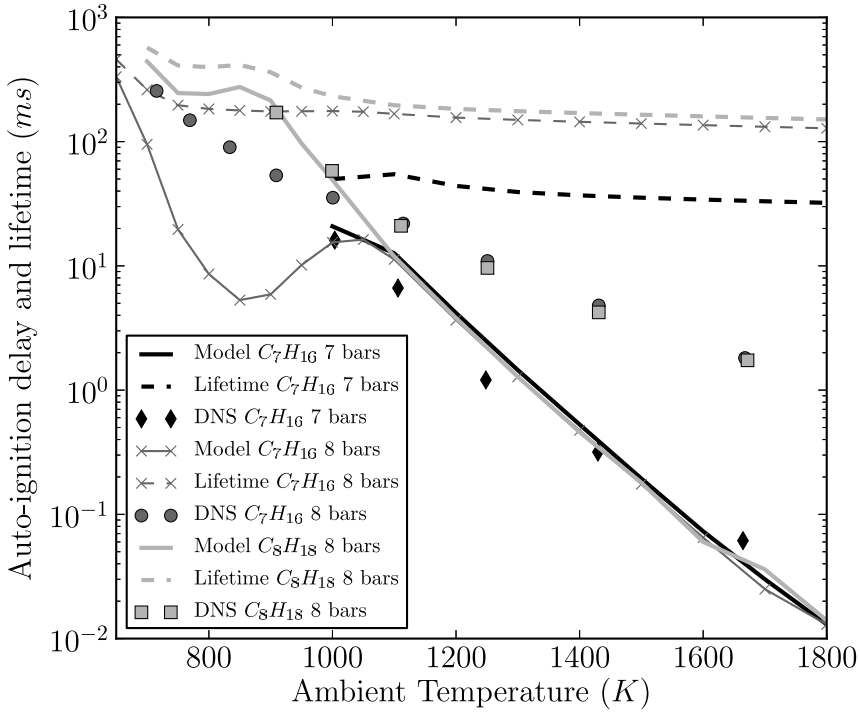

Figure 8.20 : *Comparison in log-scale of the droplet auto-ignition model and lifetime against DNS from Stauch et al. [197, 198] for two different fuels.*

8.2.5 Single droplet combustion model for "E" mode

Once the droplet has ignited, the E mode is activated for the droplet, and a model for single droplet burning is derived in the following, to treat its evolution.

Following Kuo et al. [121] or Sirignano et al. [188], when a droplet is considered burning in a envelope mode, the evaporation model needs to take into account the combustion occurring in the vicinity of the droplet. The following assumptions are made :

- A spherical and isolated droplet is considered, and effects of interaction between droplets are neglected.
- The thermal conductivity in the liquid phase is infinite which results in a uniform temperature over the droplet volume.
- The phase change occurring at the surface of the droplet is assumed to occur in a thermodynamic equilibrium with the surrounding gas phase.

The gaseous field around the droplet is considered at rest, i.e. the only non-zero velocity component at any given location results from the Stephan flow pointing in the radial direction. The gaseous field is also assumed quasi steady, which means that all equations are independent of time

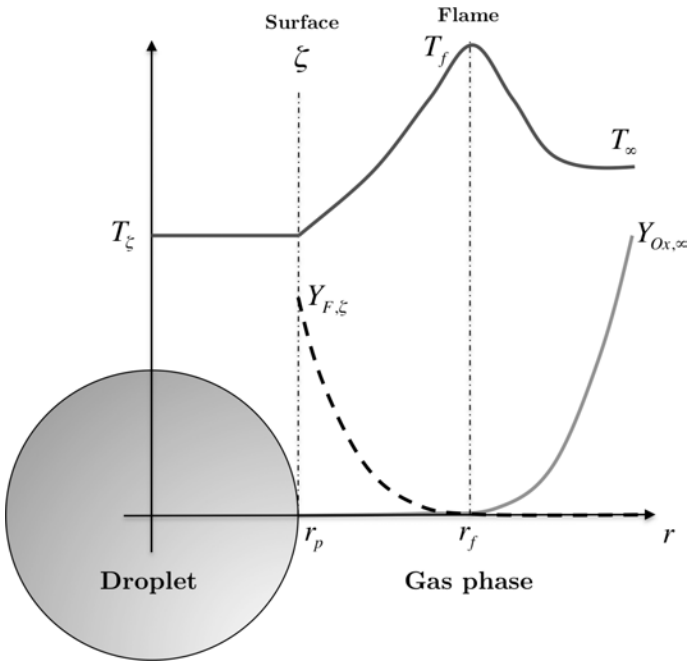

Figure 8.21 : *Evolution of the temperature T and the fuel and oxygen mass fractions Y_F and Y_{Ox} along the radial distance from a spherical single burning droplet with constant temperature T_ζ. ζ denotes the droplet surface and f denotes the position of the spherical flame.*

and the position of the liquid surface is considered fixed. This last aspect reflects the fact that $\rho_l >> \rho_g$, resulting in a small velocity of the receding liquid surface compared to the Stephan flow. The problem is formulated in spherical coordinates (see Fig. 8.21) for radii between the droplet surface (index ζ) and the far-field (index ∞). The following set of equations of the gaseous flow field for $r > r_\zeta$ is obtained [121] :

$$\text{Mass conservation :} \qquad \rho u r^2 = const. = \left(\rho u r^2\right)_\zeta = \frac{-\dot{m}_p}{4\pi} \tag{8.14}$$

$$\text{Species conservation :} \qquad \rho u r^2 \frac{dY_k}{dr} = \frac{d}{dr}\left(r^2 \left[\rho \mathcal{D}_k\right] \frac{dY_k}{dr}\right) + \dot{\omega}_k \tag{8.15}$$

$$\text{Energy equation :} \qquad \rho u r^2 \frac{dC_P T}{dr} = \frac{d}{dr}\left(\frac{\lambda}{C_P} r^2 \frac{dC_P T}{dr}\right) + \dot{\omega}_T \tag{8.16}$$

The reaction is supposed to be a global one-step reaction so that :

$$\dot{\omega}_F = \frac{\dot{\omega_T}}{Q} = s\dot{\omega}_{Ox} \tag{8.17}$$

where $\dot{\omega}_k$ is the mass consumption of species k, $\dot{\omega}_T$ the heat-release, Q the mass heat of combustion and s the stoichiometric mass ratio.

In order to integrate the previous set of equations, $\rho\mathcal{D}_k$ and λ/C_P are considered constant and evaluated following the 'third rule' approach (Sect. 4.2.2.2.5), applied between the surface and the flame front [3]. Moreover, Prandtl and Schmidt numbers (Eqs. 4.52 and 4.53) are determined following the procedure proposed by Sierra *et al.* [186] taking into account complex mixture phenomena.

The derivation of the single droplet combustion model is divided into two steps. The first step corresponds to the modeling of the temporal evolution of the droplet mass. The second step corresponds to the modeling of the temporal evolution of the droplet temperature (which is considered uniform).

8.2.5.1 Mass transfer

The model for the mass transfer between a single, isolated burning droplet and the surrounding gas is derived using the equation of species conservation (8.15), associated with two boundary conditions at the droplet surface (ζ) and at the far-field (∞).

As done in Kuo [121], two parameters are defined :

$$b_Y = \frac{Y_F - Y_{Ox}/s}{(Y_{F,\zeta} - 1) - Y_{Ox,\zeta}/s} \tag{8.18}$$

$$b_T = \frac{QY_{Ox}/s + C_P(T)T}{L_v + QY_{Ox,\zeta}/s} \tag{8.19}$$

Note that b_Y is very similar to the Spalding parameter $b = Y_F/(Y_{F,\zeta} - 1)$ appearing in the non -burning evaporating case. The oxidizer mass fraction Y_{Ox} appearing in b_Y and b_T reflects oxidizer consumption by combustion.

Conbining Eqs. 8.15 for $k = F$ and $k = Ox$ one obtains the following equation :

$$r^2 \rho u \frac{db_Y}{dr} = \frac{d}{dr}\left(r^2 \left[\rho\mathcal{D}\right] \frac{db_Y}{dr}\right) \tag{8.20}$$

Eq. 8.20 is similar to the non-reacting evaporating equation for the Spalding parameter b. This equation, integrated twice with boundary conditions at the surface $r = \zeta$ and at infinity, yields the following result [121] :

$$\dot{m}_p = -4\pi r_\zeta \left[\rho\mathcal{D}\right] ln\left(1 + B_M^{comb}\right) \quad \text{with} \quad B_M^{comb} = \frac{Y_{F,\zeta} + Y_{O,\infty}/s}{1 - Y_{F,\zeta}} \tag{8.21}$$

B_M^{comb} is readily obtainable by expressing the mass fraction of fuel at the surface using the Clausius-Clapeyron equilibrium for the phase change [121] (Sect. 4.2.2.1.1).

3. In the classical evaporation model, the boundary conditions at infinity are used.

Assuming infinitely fast chemistry, other useful information may be found. Expressing that $Y_F = Y_{Ox} = 0$ at the flame location, the radius of the spherical flame enveloping the droplet can be obtained from b_Y :

$$r_f = r_\zeta \frac{ln(1 + B_M^{comb})}{ln(1 + Y_{Ox}^\infty)} \tag{8.22}$$

Using b_T and r_f, the flame temperature can also be derived :

$$T_f = \frac{1}{C_P(T_f)}[C_P(T_p)T_p - L_v + \frac{C_P(T_\infty T_\infty - C_P(T_p)T_p + L_v + QY_{Ox}^\infty/s}{1 + Y_{Ox}^\infty/s}] \tag{8.23}$$

These two above expressions are useful to calculate the heat transfer between the gas and the droplet (Sect. 8.2.5.2)

8.2.5.2 Heat transfer

The temporal evolution of the droplet enthalpy $m_p\, h_{s,p}(T_p)$ can be obtained by writing the enthalpy balance at the surface of the droplet (Sect. 4.2.2.1.3). This leads to the following equation :

$$\frac{d\,T_p}{d\,t} = \frac{1}{m_p\, C_{P,l}} \left(-\Phi_g^c + \dot{m}_p L_v(T_p)\right) \tag{8.24}$$

where Φ_g^c is the heat flux from the gas to the liquid through the surface of the droplet, and $\dot{m}_p L_v(T_p)$ corresponds to the enthalpy of the evaporated fuel that is leaving the droplet, at temperature T_p.

In this equation, Φ_g^c has to be obtained by integrating the energy equation (Eq. 8.16) in the inner space between the thin flame and the surface of the droplet. In this area, there is no reaction, so that $\dot{\omega}_T = 0$, which highly simplifies the equation. Mass conservation (Eq. 8.14) allows to replace $r^2\rho u$ on the left hand side by $r_\zeta^2 \rho_\zeta u_\zeta = \dot{m}_p/4\pi$:

$$\dot{m}_p \frac{dC_P T}{dr} = 4\pi \frac{d}{dr}\left(\frac{\lambda}{C_P} r^2 \frac{dC_P T}{dr}\right) \tag{8.25}$$

Integration of this equation yields :

$$\dot{m}_p\, C_P T = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{C_P} \frac{dC_P T}{dr} + c_1 \tag{8.26}$$

where c_1 is a constant determined by the boundary condition at the surface ζ :

$$\dot{m}_p\, C_P T_\zeta = 4\pi r_\zeta^2 \frac{\lambda}{C_P} \left[\frac{dC_P T}{dr}\right]_\zeta + c_1 \tag{8.27}$$

By definition, the quantity of the right hand side of the previous equation is the conductive heat flux :

$$4\pi r_\zeta^2 \frac{\lambda}{C_P} \left[\frac{dC_P T}{dr}\right]_\zeta = -\Phi_g^c \tag{8.28}$$

which leads, when injected in Eq. 8.26, to :

$$\dot{m}_p \left(C_P(T)T - C_P(T_\zeta)T_\zeta - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_p} \right) = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{C_P} \frac{dC_P T}{dr} \tag{8.29}$$

The separation of the variables r and T and a second integration gives :

$$-\frac{1}{r} = \frac{4\pi\lambda/C_P}{\dot{m}_p} ln \left(C_P(T)T - C_P(T_\zeta)T_\zeta - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_p} \right) + c_2 \tag{8.30}$$

Applying now the boundary conditions at the flame front, known from the mass conservation, allows to obtain c_2. One finally obtains :

$$\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r} = \frac{4\pi\lambda}{C_P \dot{m}_p} ln \left(\frac{C_P(T)T - C_P(T_\zeta)T_\zeta - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_p}}{C_P(T_f)T_f - C_P(T_\zeta)T_\zeta - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_p}} \right) \tag{8.31}$$

In this expression, the flame radius and temperature are known by Eqs 8.22 and 8.23 respectively. By introducing them and evaluating the expression at the surface of the droplet, one obtains :

$$\frac{\dot{m}_p}{4\pi\lambda/C_P r_\zeta} - \frac{1}{\mathcal{L}_e} ln\left(1 + Y_{Ox}^\infty/s\right) = ln \left(1 + \frac{C_P(T_f)T_f - C_P(T_\zeta)T_\zeta}{-\Phi_g^c} \right) \tag{8.32}$$

where $\mathcal{L}_e$ is the Lewis number of the mixture.

Equation 8.32 is a relation between the gaseous temperature as a function of the radial distance and the conductive enthalpy flux at the liquid surface. It does not directly contain the desired information on Φ_g^c. However, it provides an expression for the mass flux $\dot{m}_p$ that is different from Eq. 8.21 :

$$\dot{m}_p = \frac{4\pi\lambda r_\zeta}{C_P} ln\left(1 + B_T^{comb}\right) \tag{8.33}$$

In this case, $\dot{m}_p$ depends on the temperature transfer number B_T^{comb} :

$$B_T^{comb} = 1 - \left(1 + \dot{m}_p \frac{C_P(T_f)T_f - C_P(T_\zeta)T_\zeta}{-\Phi_g^c} \right) \left(1 + Y_{Ox}^\infty/s\right)^{1/\mathcal{L}_e} \tag{8.34}$$

By equating Eqs. 8.21 and 8.33, a relation can be obtained between B_M and B_T^{comb} :

$$B_T^{comb} = \left(1 + B_M^{comb}\right)^{\frac{1}{\mathcal{L}_e}} - 1 \tag{8.35}$$

By rearranging Eq. 8.34 and replacing the mass flux $\dot{m}_p$ using Eq. 8.33, one finally obtains Φ_g^c as a function of the known temperatures T_ζ and T_f as well as of B_T^{comb}, obtained from the value of B_M^{comb}, through Eq. 8.35.

$$\Phi_g^c = 4\pi \frac{\lambda}{C_P} r_\zeta ln(1 + B_T) \frac{(C_P(T_f)T_f - C_P T_\zeta T_\zeta)}{\frac{1+B_T}{(1+Y_{Ox}^\infty/s)^{1/\mathcal{L}_e}} - 1} \tag{8.36}$$

The expression of Φ_g^c is injected in the equation of evolution of the droplet temperature (Eq. 8.24), which can then be solved numerically.

Note that in this single droplet combustion model, the evaporated fuel is suppose to burn completely, thanks to the fast chemistry hypothesis. Therefore, we have instantaneously $\dot{m}_p = \dot{\omega}_F$ which is an approximation that may be too inaccurate, as shown by Law *et al.* [124]. Indeed, Law *et al.* show that the instantaneous total fuel consumption rate around the recessing droplet can be different than the evaporation rate for a single burning droplet. The condition $\dot{m}_p = \dot{\omega}_F$ is obtained only in strictly steady configuration, such as flames stabilized around a porous sphere, where the surface is not recessing. On the contrary, for a burning droplet, $\dot{m}_p > \dot{\omega}_F$ at the beginning of the droplet burning, because the flame surface is initially insufficient to burn all the incoming fuel, and $\dot{m}_p < \dot{\omega}_F$ later on, when the accumulated fuel is burning. The transient study of [124] also shows that the the quasi-steady approximation is reasonable as soon as the initial transient process is short compared to the complete lifetime of the droplet. Relatively large droplets fall into this category where the initial transient period can be reasonably neglected. As in the current *MuStARD* model, single droplet combustion is limited to the burning of relatively large droplets [4], and as it would be too expensive to take into account this unsteadiness in the CFD modeling, the hypothesis $\dot{m}_p = \dot{\omega}_F$ is reasonably kept in a first approach.

Usually, droplets have a non-zero velocity relative to the surrounding gas, which can be taken into account by introducing classical correlations like those proposed by Ranz and Marshall [169] , which appears as a Sherwood number mutliplying Eq. 4.44 (cf. Sect. 4.2.2.2.1). However, for single burning droplets, the classical correlations do not hold. No pertinent correction was yet found to introduce a modification of the evaporation rate under relative convection, for a burning droplet.

8.2.5.3 *Validation against experiments of spark ignited burning droplet*

The single droplet combustion model is validated by comparison with experiments of single droplet burning, in which the droplet is ignited by a spark at a location close to the droplet surface. No ignition or extinction criteria are thus necessary in this validation. The single droplet burning model was implemented in a 0D code, solving the evolution of a single burning droplet (Eqs. 8.21 and 8.24). The droplet is assumed ignited. Several different fuels are tested to show the robustness and validity of the model.

First, a fiber-suspended n-decane droplet experiment by Xu *et al.* [226] is considered. Spark-ignited droplets of diameter about 1 mm are burning at ambient pressure and temperature. Results of the comparison are displayed in Fig. 8.22 for droplet diameters. The evolution of the diameter is very well recovered by the model. In particular, the slope of the D^2-curve is very similar to experimental results, meaning that the quasi-steady state evolution is very well captured. Small differences in the lifetime predictions are observed, which can be related to uncertainties of the

4. thanks to ignition and extinction criteria which describe the fact that small droplets are less subjected to single droplet combustion

spark ignition in the first instants. Indeed, in the experiments, a small delay is necessary to establish a fully developed spherical flame around the droplet. This delay is difficult to evaluate precisely in the experiment. Simulation curves could be shifted by this delay, but this would not change our conclusions.

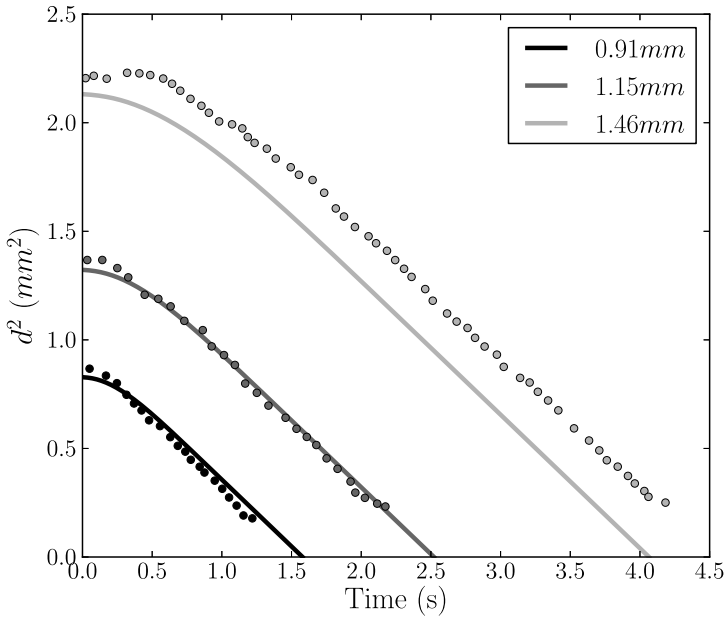

Figure 8.22 : *Comparison with experiment : evolution of n-decane burning droplets in atmospheric conditions. Experiments from Xu et al. [226].*

Second, the experiment performed by Hara *et al.* with small n-heptane droplets in microgravity is studied. Results are displayed in Fig. 8.23. As done in [8], the simulation results are shifted by 0.8 s/mm^2 to the left, to take into account the initial establishment delay of the flame after spark ignition. The agreement for n-heptane is also very good. The change of slope in the experimental data at the end is due to the extinction of the flame in the experiment, which was not introduced in the model at this stage, but will be discussed in Sect. 8.2.6.

Third, recent experiments using complex fuel were performed by Liu *et al.* [132] in microgravity. In addition, the flame radius was estimated visually in the experiment. Two ambient cases with different fuels are computed, for which reaction mechanism and thermodynamic characteristics are readily available. Results for a 0.53 mm iso-octane droplet and a 0.58 mm Jet-A droplet are respectively displayed in Figs. 8.24 and 8.25. Once more, the agreement is particularly good for the evolution of the diameter and the prediction of the droplet lifetime. In particular, the quasi-steady d^2 decrease is well captured. However, when looking at the flame radius evolution, a very large discrepancy can be observed between simulation and experiment in both cases. This error was already mentioned and is further discussed below.

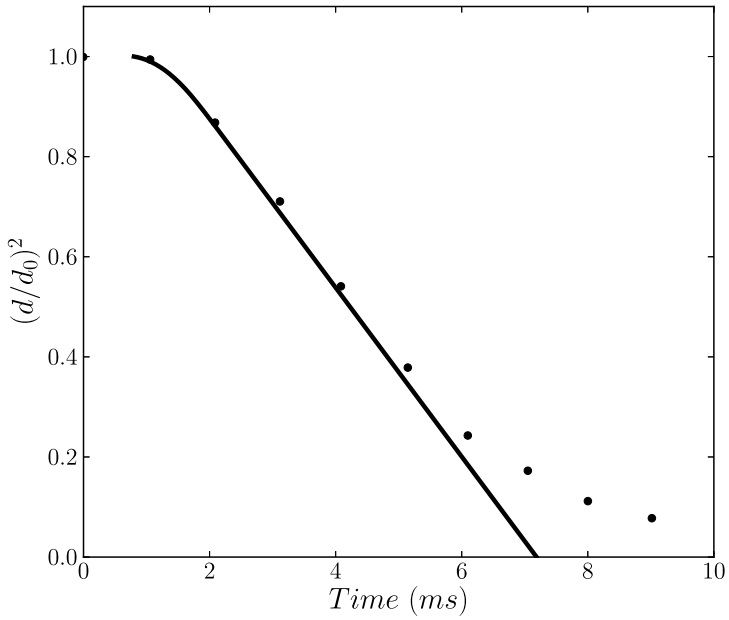

Figure 8.23 : *Comparison with experiment : evolution of an n-heptane burning droplet in atmospheric conditions. Experiments from Hara et al. [90].*

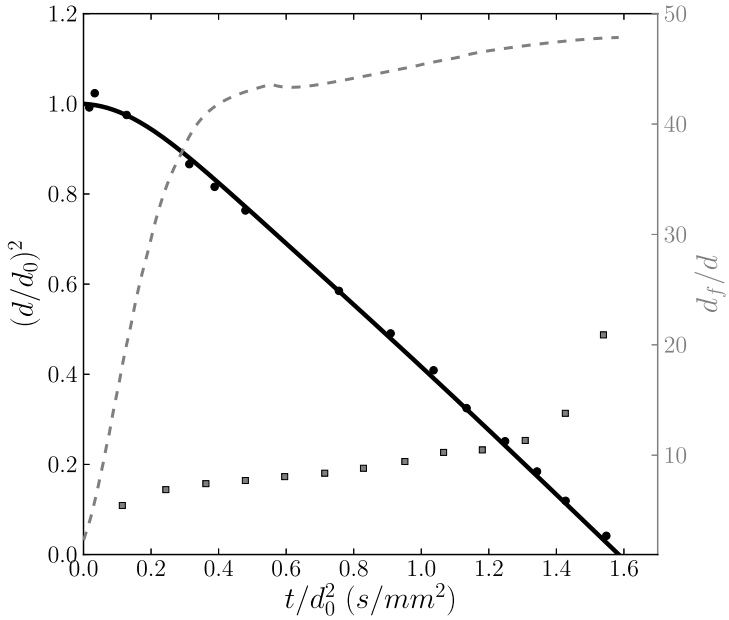

Figure 8.24 : *Evolution of an iso-octane burning droplet at atmospheric conditions : droplet and flame diameters. Symbols : Experiments from Liu et al. [132]. Lines : present simulation.*

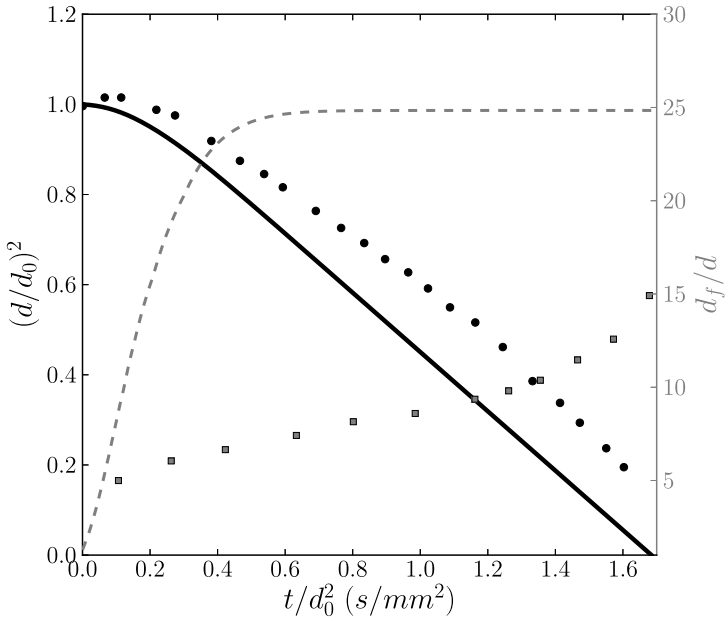

Figure 8.25 : *Evolution of a Jet-A burning droplet at atmospheric conditions : droplet and flame diameters. Symbols : Experiments from Liu et al. [132]. Lines : present simulation.*

Experiments report flame radius ratios d_f/d in the range [5,15], which is around two to five times smaller than the numerical result ($\sim 20-30$). This is related to unsteady effects already mentionned in Sect. 8.2.5.2, leading to the difference between fuel evaporation and consumption [124]. Law *et al.* [124] show that, at the time of ignition, the evaporation rate is low and the flame stabilizes very close to the surface of the droplet. The surface of the flame front is thus small and not sufficiently large to burn all the evaporated fuel. Then, while the evaporation rate increases due to the presence of the flame close to the surface, the flame moves away from the surface. During this transient period, gaseous fuel accumulates in the region between the flame front and the droplet surface, moving the stoichiometric line further away from the surface.

Law *et al.* [124] managed to capture this transient behavior by introducing in the set of equations, two different mass flow rates $\dot{m}_1 = \dot{m}_p$ and $\dot{m}_2 = \dot{\omega}_F$, instead of only one, so as not to impose $\dot{m}_p = \dot{\omega}_F$. Because of the additional degree of freedom, the problem needs to be closed, which is done by looking at the overall conservation of the fuel around the droplet. Law *et al.* [124] show that their pseudo-unsteady model is able to recover a flame radius as in the experiment. This transient effect stays visible all along the lifetime of the droplet and controls the flame radius. When considering the quasi-steady assumption as done in our model, the flame is fast enough to adapt instantaneously to a fuel vapor change and reach its steady state position, which corresponds to a perfect balance between the evaporation rate and the consumption rate.

In spite of this over-prediction of the flame radius, the study of [124] with a transient model shows that the prediction of the evaporation rate in the quasi-steady approximation is still reasonable if the initial transient process is short compared to the complete lifetime of the droplet. This explains the good accuracy of the quasi-steady approach for the evaporation of large droplets. As single droplet combustion occurs mostly for large droplets, the quasi-steady approximation is considered sufficient for this study.

8.2.6 Extinction of an isolated burning droplet : transition E → V

In the literature, three main mechanisms of droplet extinction have been observed [123, 34, 224, 53, 163]. First, for large droplets, extinction of the spherical flame is promoted by radiative heat loss [34, 53]. Second, the flame can be blown off when the relative velocity between the droplet and the flow is too important [224, 163]. Last, when droplets become very small, the flame can not be sustained anymore because chemistry can not anymore compete with the fast diffusion of temperature and species [224, 123].

Note a particular extinction behavior of methanol droplets, due to the presence of a large amount of water vapor in the methanol oxidation products, which promotes extinction [151, 7]. This particularity is not present in common aeronautical fuels such as n-alkane or *Jet-A*, and will not be considered here.

In the design of the present droplet extinction criterion, the radiative-loss mechanism is not considered because droplet diameters are small enough to neglect this phenomena [53]. The extinction criterion is constructed by combining the two other extinction mechanisms, either diameter-piloted or convection-piloted.

The diameter-piloted extinction criterion is taken from the droplet asymptotic theory of Law *et al.* [123], which gives the following evaluation of the extinction diameter of a burning droplet [224, 163] :

$$d_{ext}^2 = 2X\mathcal{D}_M \frac{\ln^4(1+Y_{Ox}^\infty/s)}{\ln^2(1+B)} \tag{8.37}$$

with

$$X = \frac{W_F}{A\,\rho_{g,M}\left(\frac{C_{P,M}T_f^2}{T_a}\right)^3}\frac{L_v}{Q}\frac{1+B}{1+Y_{Ox}^\infty/s}e^{1+T_a/T_f} \tag{8.38}$$

and

$$B = \frac{QY_{Ox}^\infty/s + C_{P,R}(T_g - T_p)}{L_v} \tag{8.39}$$

where A is the pre-exponential factor, Q the heat of combustion, T_a the activation energy, $C_{P,R}$ the calorific capacity evaluated at the third rule reference state. The conditions denoted $_M$ correspond to an evaluation at a temperature $T_M = \frac{T_f+T_g}{2}$, where T_f is the flame temperature around the droplet (Eq. 8.23), as proposed in [163]. X is a chemical time scale valid near extinction, evaluated using the asymptotic theory of Linan [130, 224].

For convection-piloted extinctions, several approaches were proposed in the literature : Pope and Gogos [163] made use of the same asymptotic theory of Law *et al.* [123] to obtain the relative velocity at which extinction occurs. Bilger [18] makes use of the laminar diffusion flame theory to link the extinction relative velocity to the experimental laminar strain rate of extinction of a counterflow diffusion flame. Wu *et al.* [225] and Huang *et al.* [45] produced a DNS database to obtain extinction velocities and criteria. These methods could all be used to construct the extinction criterion. However, results differ significantly and the lack of experimental results does not allow to distinguish a particular one. Moreover, these approaches are not sufficiently generic, in terms of droplet size, fuel characteristics, ambient pressure and temperature, to be readily used in an industrial CFD framework. A simple threshold approach is therefore preferred here to ensure that a droplet does not stay in an envelope mode when the relative convection is too strong. Above a certain value of relative velocity, extinction occurs and the droplet goes back to the V mode. To evaluate this threshold, two characteristic time scales are compared. A convective time scale based on potential flow theory around a sphere [224], can be obtained as :

$$\tau_{conv} = \frac{d_p}{6\|\mathbf{u_p} - \mathbf{u_g}\|} \tag{8.40}$$

A chemical time-scale is obtained as the inverse of the fuel comsumption rate by :

$$\tau_{chem}^{ext} = A^{-1}(\rho_g Y_{Ox}^{\infty})^{1-a_{Ox}-a_F}\ (sW_F)^{a_F-1}\ (W_{Ox})^{a_{Ox}}\ e^{\frac{T_a}{T_f}} \tag{8.41}$$

where a_* are the orders of the oxidation reaction. This chemical time scale differs from the chemical time-scale used in the auto-ignition criteria, because, in the extinction case, it is necessary to take into account the oxygen mass fraction in the upstream flow, and not considerer the chemical time-scale at stochiometry.

Extinction occurs if the chemical reaction is not sufficiently fast to sustain the flame while it is entrained away from the droplet by the relative flow motion. The limit corresponds to $\tau_{conv} \sim \tau_{chem}$, corresponding to the following extinction velocity u_{ext} :

$$u_{ext} = \frac{d_p}{6\ \tau_{chem}} \tag{8.42}$$

Finally, the conditions for which extinction of the burning droplet occurs are :

$$\|\mathbf{u_p} - \mathbf{u_g}\| > \mathbf{u_{ext}} \tag{8.43}$$

$$d_p < d_{ext} \tag{8.44}$$

The full validation of such criteria is still difficult as no sufficiently detailed experimental database is yet available. However, a partial validation is made below.

First, the validity of the extinction diameter expression is checked by comparing with the experimental observation of droplet extinction by Hara *et al.* [90]. For an ignited n-heptane droplet of 72

μm, extinction is found visually to occur at a diameter of about 25 μm. Criterion Eq. (8.44) gives 28 μm, which is a reasonable estimation. Second, extinction velocity from Eq. (8.43) is compared to results of simulations of droplet extinction performed by Pope *et al.* [163]. Results are displayed in Fig. 8.26. Although the general trend is correct, the model over predicts the extinction velocity by one order of magnitude. This means that the extinction criterion underpredicts extinction but it still ensures extinction for large relative motion. In a first approach, it is considered a sufficiently good compromise as it leads to the blow off of the envelope flame in highly convective flows.

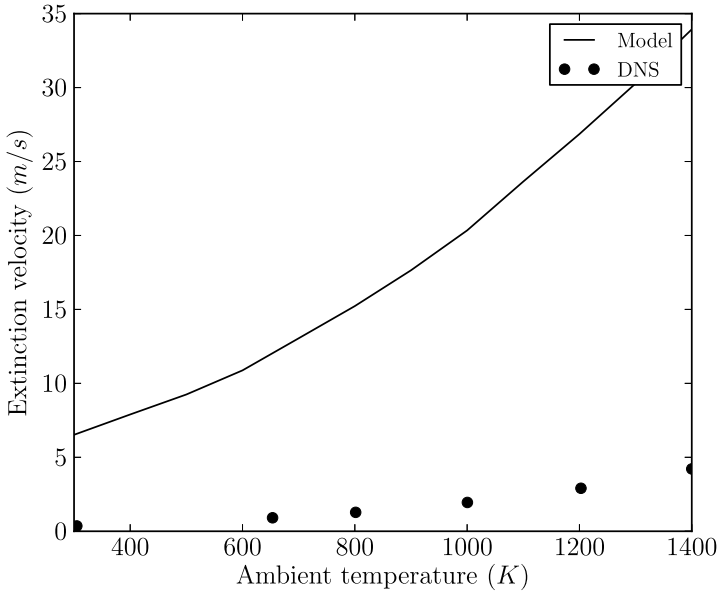

Figure 8.26 : *Droplet extinction velocity. Symbols : DNS results from Pope et al. [163]. Line : present model.*

Typical variations of the extinction diameter and the extinction velocity with the ambient temperature, pressure and oxidizer mass fraction are displayed in Figs 8.27 and 8.28, for a 100 μm droplet. The extinction diameter decreases with increasing temperature and increasing oxidizer mass fraction. The extinction velocity increases with temperature and oxidizer mass fraction.

8.3 Summary of the chapter

In this chapter, two models are developped. First, the TP-TFLES model is developed and validated : the combustion model TFLES is taken into account in the spray computation, to insure that laminar homogeneous spray flame structures are well recovered in LES. Second, *MuStARD* was developed to enable single droplet combustion in LES. The model consists in a single droplet combustion model, which is activated thanks to different criteria checking if a droplet is burning individually. *MuStARD* is validated step by step with simple experiments, which gives good overall

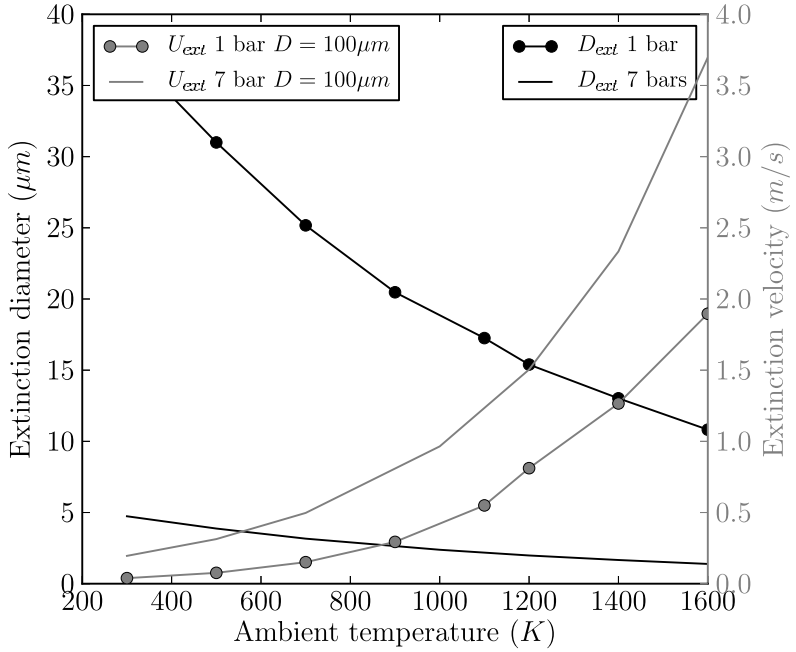

Figure 8.27 : *Variation of the extinction criteria with temperature and pressure for a* 100 μm *n-heptane droplet.*

results, and is implemented in AVBP. In the next chapter, *MuStARD* will be applied to more complex configurations.

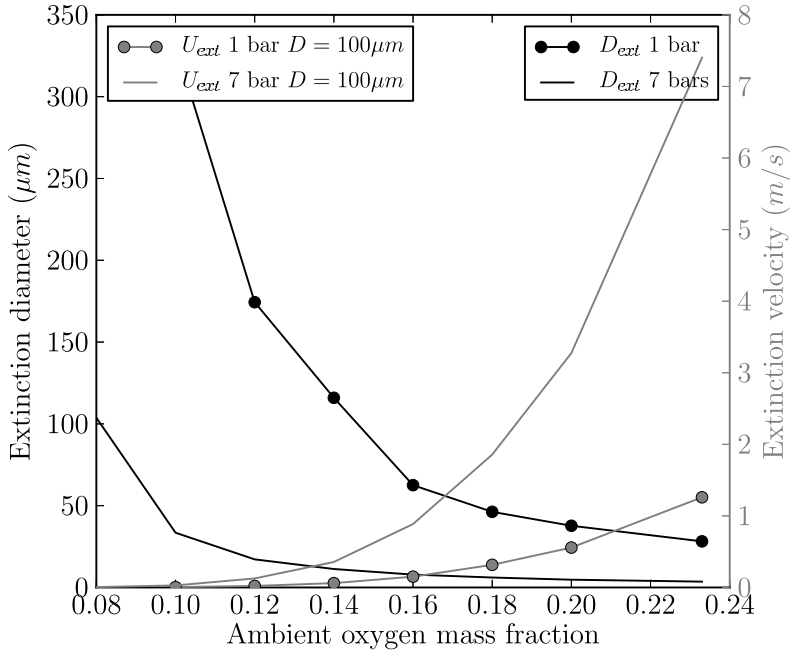

Figure 8.28 : *Variation of the extinction criteria with oxygen mass fraction and pressure for a* 100 μm *n-heptane droplet.*

Chapitre 9

Application du modèle *MuStARD* à des cas académiques simples

Sommaire

9.1 Goutte isolée statique - configuration 0D 176
9.2 Train de gouttes dans un écoulement chaud - configuration 1D 177
9.3 Flamme laminaire à contre-courant diphasique - Configuration 2D 179
9.3.1 Comparaison avec un cas expérimental 179
9.3.2 Flamme contre-courant diphasique en condition de fonctionnement type moteurs aéronautiques 188
9.4 Conclusions sur ce chapitre 191

Dans ce chapitre, le modèle *MuStARD* est appliqué à des cas relativement simples, dans un ordre de complexité croissante. Les situations étudiées sont choisies pour fournir un élément de validation au modèle *MuStARD*, soit en comparaison d'une expérience adaptée, soit par l'étude d'un cas simplifié permetant d'analyser le comportement particulier du modèle *MuStARD* et son apport par rapport à l'approche classique.

Trois configurations sont étudiées et présentées dans la suite. Tout d'abord, l'évolution d'une goutte isolée statique est comparée à des données expérimentales (configuration "0D"). Ensuite, un train de gouttes isolées injectées sur une ligne, à la même vitesse qu'un écoulement chaud et oxydant est étudié (configuration "1D"). Enfin, une configuration d'écoulement à contre-courant avec spray, s'appuyant sur un cas expérimental, est abordée (configuration "2D"). La dernière étape de validation, à savoir l'application à une configuration 3D pleinement turbulente, fait l'objet de la dernière partie de cette thèse (Chap. 10 à 12). Dans la suite, la dénomination *AS* correspond à une simulation se faisant uniquement avec le modèle d'évaporation standard d'Abramzon-Sirignano (Sect. 4.3). Dans un soucis de simplicité, on désignera par "simulation *MuStARD* ", les simulations utilisant le modèle *MuStARD*.

9.1 Goutte isolée statique - configuration 0D

Le modèle *MuStARD* est tout d'abord comparé à une expérience de goutte isolée s'auto-allumant. Les résultats expérimentaux sont tirés du travail de Xu et al. [226], et correspondent aux évolutions de gouttes de n-décane, suspendues au bout d'une fibre, et plongées dans une chambre de combustion à 1097 K et pression atmosphérique. Cette expérience est reproduite grâce au modèle 0D présenté en Sect. 8.2.5.3 et qui permet de calculer l'évolution d'une goutte isolée avec *MuStARD*. La comparaison est présentée en Fig. 9.1, pour trois diamètres de gouttes différents, tous de l'ordre du mm. Les instants correspondants à l'auto-allumage et à l'extinction de la goutte, détectés respectivement par le critère d'allumage et d'extinction, sont aussi indiqués. On remarque tout d'abord que le modèle *MuStARD* prédit un auto-allumage très rapide et une extinction en diamètre très tardive : la goutte est en mode E la quasi-totalité de sa vie. Dans l'expérience, Xu *et al.* observe bien un auto-allumage précoce et une extinction tardive, sans fournir une mesure des instants d'allumage et d'extinction du fait de la difficulté de les quantifier visuellement.

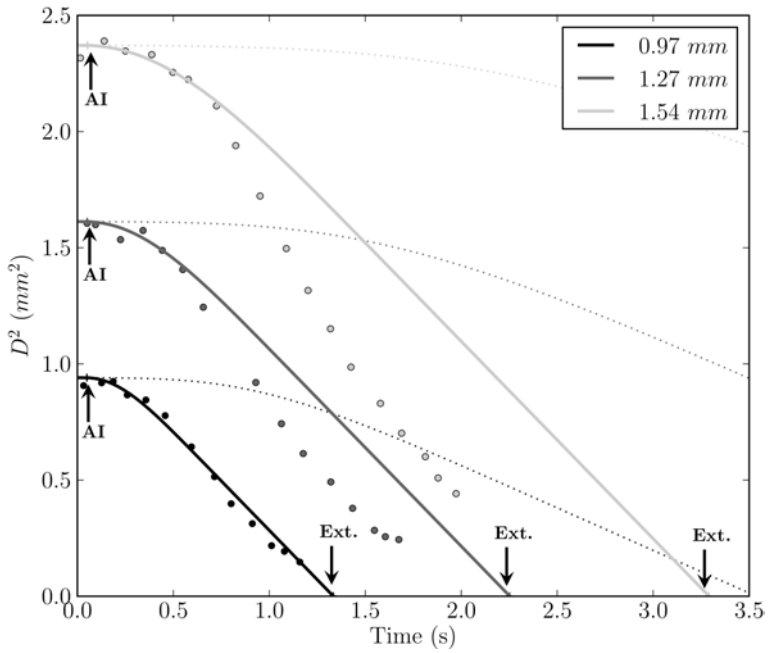

Figure 9.1 : *Comparaison entre le modèle MuStARD (lignes) et l'expérience (symboles) de [226]. Gouttes de n-décane plongées dans un environnement d'air à 1097 K et pression atmosphérique. Les lignes en pointillés correspondent aux résultats de simulation avec modèle d'évaporation seul AS.*

En ce qui concerne l'évolution temporelle de la goutte de 0,97 mm, l'accord est tout à fait satisfaisant, notamment en terme de temps de préchauffage, de pente de l'évolution en d^2 et de temps de vie. En revanche, pour les diamètres supérieurs à 1 mm, le modèle *MuStARD* sur-prédit le temps de vie de la goutte, avec un écart qui augmente avec le diamètre initial. Lorsqu'on analyse plus finement les résultats expérimentaux, on constate que l'évolution en d^2 n'est pas de pente

constante et dépend du diamètre initial. Or, la pente de la loi en d^2 issue du modèle de combustion de goutte isolée (Sect. 8.2.5) ne dépend pas de ce diamètre initial (comme le montrent les résultats visibles en Fig. 9.1). Un très grand nombre d'expériences de gouttes évaporantes, mais aussi de gouttes allumées (Fig. 8.22) confirment cette non-dépendance de la pente au diamètre initial de la goutte. L'expérience de Xu fait donc vraisemblablement apparaître un comportement physique supplémentaire. En fait, dans cette plage particulière de température, Xu et al. [226] observent, pour les gouttes de n-décane spécifiquement, un rayonnement important, lié à la formation d'une couche de suie englobant la goutte. L'intensité de ce rayonnement est d'autant plus important que le diamètre initial de la goutte est grand. Le rayonnement a pour conséquence directe d'augmenter le taux d'évaporation de la goutte. De ce fait, Xu et al. observe une dépendance de la décroissance en D^2 au diamètre initial de la goutte. Le modèle *MuStARD* ne prenant pas en compte la formation possible de suies, ni le rayonnement en résultant, ce phénomène peut expliquer l'écart aux mesures observé en Fig. 9.1.

Cependant, l'influence du rayonnement est essentiellement visible sur les gouttes de diamètre supérieur à 1 mm [226] et dans des conditions environnantes permettant une apparition importante de suies. Or, ces très grosses gouttes sont peu, voire pas présentes dans les applications visées, où sont générées plutôt des gouttes de l'ordre du dixième de mm. Etant donné les résultats satisfaisants obtenus pour la goutte de 0.97 mm, ainsi que les validations précédentes de gouttes allumées (Figs. 8.22,8.23, 8.24 et 8.25), le modèle *MuStARD* peut être appliqué avec un bon niveau de confiance dans les applications visées. De plus, si l'on compare sur ce cas particulier le modèle *MuStARD* au modéle d'évaporation seul *AS* (lignes pointillés en Fig. 9.1), on observe clairement l'amélioration apportée par *MuStARD*. En prenant en compte l'auto-allumage puis l'évolution de la goutte en combustion isolée, on réduit très fortement l'écart à l'expérience.

9.2 Train de gouttes dans un écoulement chaud - configuration 1D

La deuxième situation étudiée correspond à l'injection d'un train de gouttes dans une géométrie 1D. Des gouttes de n-heptane, de 200 μm de diamètre, initialement à 300K, sont injectées à la même vitesse (0.2 m/s) qu'un écoulement d'air laminaire chaud (1050K) à pression atmosphérique. La richesse globale à l'injection est égale à 0.6. Dans ces conditions de température et de pression, une simulation 0D montre notamment que les gouttes s'auto-allument avant leur évaporation complète. Dans la mesure où il n'y a pas de mesure de cette configuration, seule la comparaison des deux simulations avec *MuStARD* et *AS* est montrée en Fig. 9.2.

Le modèle *MuStARD* prédit l'auto-allumage des gouttes à environ 0,25 cm du point d'injection, lorsque l'indicateur I_{LW} atteint l'unité (Fig. 9.2 d.). On remarque une rupture de pente pour l'ensemble des valeurs liées à la phase liquide : augmentation rapide de la température des gouttes à partir de l'allumage, augmentation de la régression du diamètre. Le taux de consommation de la

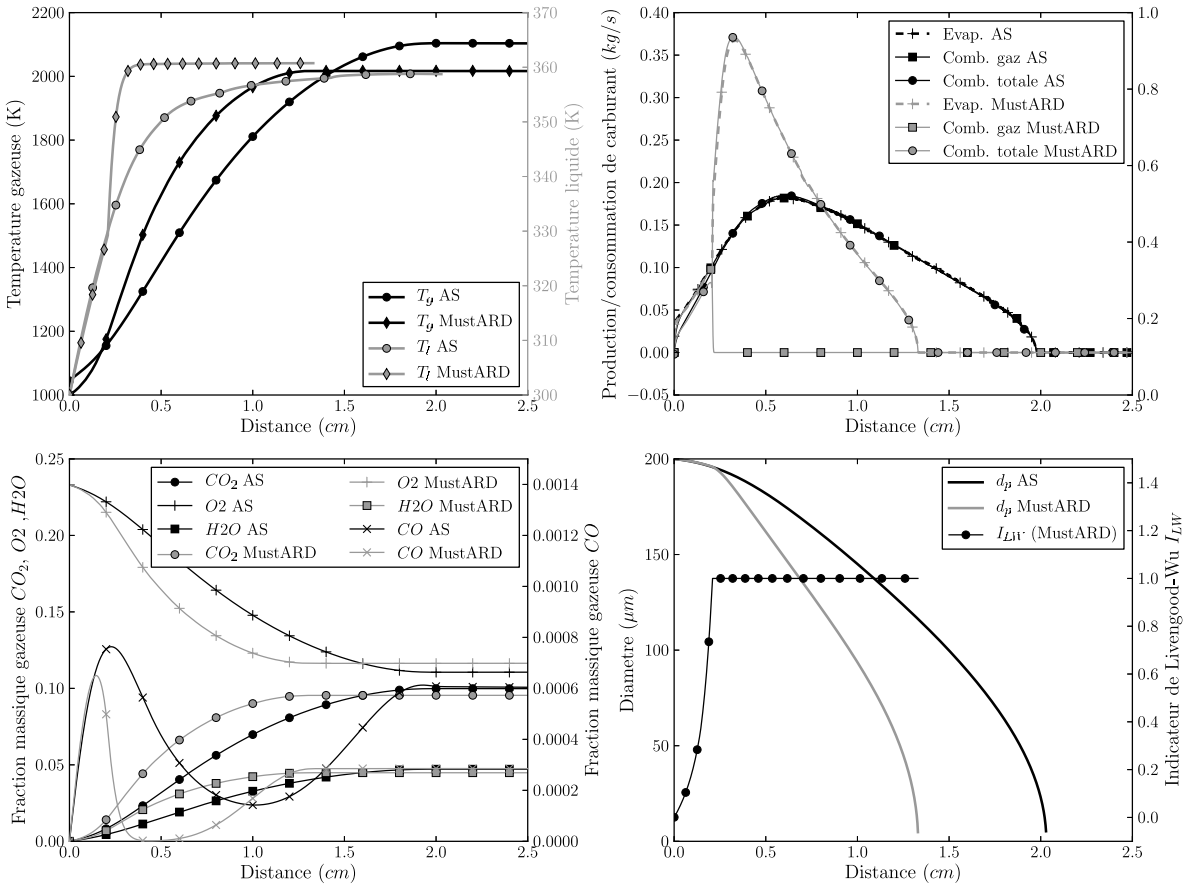

Figure 9.2 : *Configuration 1D (train de gouttes dans un écoulement chaud) : Comparaison des profils instantanés des variables gazeuses et liquides, obtenus avec les modèles MuStARD et AS. (a) températures gazeuse et liquide, (b) taux de production (évaporation) et de consommation (combustion) de vapeur de carburant dans la phase gazeuse et totale (i.e. avec la combustion de goutte), (c) fractions massiques d'espèces, (d) diamètre et Indice de Livengood-Wu.*

vapeur de carburant se fait exclusivement en combustion de goutte isolée (Fig. 9.2 b.). Les gouttes subsistent jusqu'à 1.4 *cm* environ.

En ce qui concerne la simulation *AS*, aucune rupture de pente n'est visible, puisque les gouttes restent dans un mode purement évaporant. En revanche, la température de 1000 *K* est suffisamment forte pour activer la combustion de la vapeur de fuel. Ainsi, le carburant évaporé est transféré à la phase gazeuse et est intégralement et localement brûlé. Le taux de consommation est donc entièrement piloté par le taux d'évaporation local (Fig. 9.2 b.). Cette réaction entraine une augmentation significative de la température gazeuse.

Pour les deux simulations, les conditions finales sont identiques puisque la combustion complète du carburant liquide a lieu avant la sortie. La seule différence vient du fait que la combustion se

fait très majoritairement au niveau des gouttes pour le modèle *MuStARD* et entièrement au niveau de la phase gazeuse pour la simulation *AS*. De plus, des différences locales de comportement sont observées : le modèle d'évaporation seul n'ayant pas la possibilité de prendre en compte la présence d'une flamme proche de la goutte, la simulation *AS* prédit un temps de préchauffage plus long et un taux d'évaporation local plus faible qu'avec modèle *MuStARD*. De ce fait, le temps de vie des gouttes est plus long, la pénétration du train de goutte plus grande ($\sim 2\ cm$) et le taux de dégagement de chaleur plus étalé dans la simulation *AS* avec modèle d'évaporation seul.

L'écart entre les modèles reste relativement faible dans ce cas précis, par rapport au cas précédent (Fig. 9.1), car la température gazeuse vue par la goutte est relativement importante et augmente au fur et à mesure que la réaction a lieu. En effet l'évolution d'une goutte en combustion est relativement similaire à l'évolution d'une goutte s'évaporant dans un univers proche de 2000 K.

Cette configuration permet aussi de valider l'implantation du couplage liquide-gaz avec le modèle *MuStARD*, puisque la température de fin de combustion est correcte en sortie de la chambre 1D. En conclusion, on constate donc un effet notable du modèle *MuStARD*, notamment en terme de prédiction du temps de vie de la goutte. L'influence relative du modèle *MuStARD* diminue, lorsque la température environnante augmente.

9.3 Flamme laminaire à contre-courant diphasique - Configuration 2D

9.3.1 Comparaison avec un cas expérimental

9.3.1.1 Présentation de la configuration expérimentale

Une configuration à contre-courant avec injection liquide, présentant une interaction forte entre la flamme et le spray, a été étudiée par Mikami *et al.* [143]. Pour l'un des points de fonctionnement qui correspond à une distribution relativement chargée en gouttes de grandes tailles, les auteurs observent très clairement une combustion de goutte isolée, après la traversée d'une première flamme de diffusion homogène. Ce cas peut donc servir d'élément de validation pour le modèle *MuStARD*.

Le dispositif expérimental est constitué de deux tubes verticaux et coaxiaux, de 23 mm de diamètre, mis face à face, générant un écoulement laminaire à contre-courant avec plan de stagnation (Fig. 9.3). Les sorties des tubes sont distantes de la longeur $L = 10\ mm$. Le spray liquide de n-heptane est injecté à l'entrée du tube inférieur par le biais d'un injecteur pressurisé. Le spray est ensuite entrainé par l'écoulement à travers le tube jusqu'à déboucher dans la zone d'injection. Le temps convectif associé est suffisamment long pour que la vitesse des gouttes du spray s'équilibrent avec celle de la phase gazeuse qui les porte. Le point de fonctionnement étudié correspond à une injection d'oxygène pur à température ambiante dans le tube supérieur, et d'une injection liquide avec de l'azote pur à température ambiante dans le tube inférieur. Après allumage forcé,

une flamme se stabilise entre les deux jets. La richesse globale est de $0,63$. L'étirement de la configuration est estimé à 320 s^{-1} en utilisant la valeur théorique du gradient de vitesse au point de stagnation :

$$a = \frac{2}{L}\left(V_+ + V_-\sqrt{\frac{\rho_-}{\rho_+}}\right) \tag{9.1}$$

où V est la vitesse axiale et $+$ et $-$ désignent respectivement les conditions d'entrées dans le tube supérieur et inférieur.

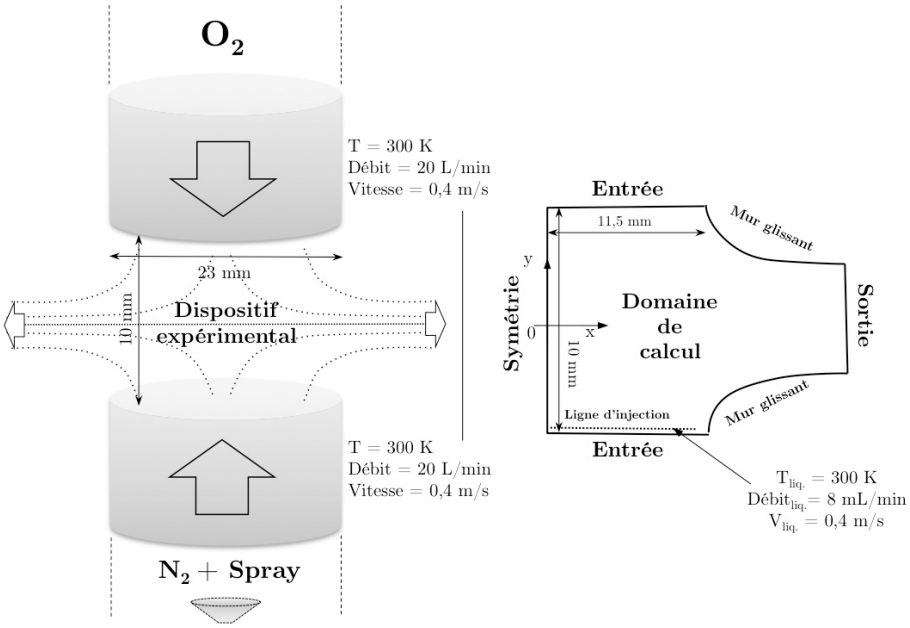

Figure 9.3 : *Schéma du dispositif expérimental de Mikami et al. [143] (gauche) et du domaine numérique et des conditions limites associées (droite).*

Les auteurs fournissent la distribution en taille des gouttes en sortie du tube inférieur (Fig. 9.4), avant le début de l'évaporation, ainsi qu'une image de la flamme bleue, obtenue avec un temps de pause de 33 ms (Fig. 9.7).

9.3.1.2 Présentation de la configuration numérique

Le domaine de calcul commence à la sortie des tubes. Le domaine est 2D-plan, donc non axi-symétrique comme l'expérience, entrainant une dilatation radiale des gaz plus faible. En revanche, les profils des vitesses en zone proche de l'axe de symétrie dans les cas 2D-plan et axi-symétrique ont des comportements similaires. Les vitesses d'entrées de la simulation sont obtenues en calculant, à partir des débits expérimentaux, les vitesses moyennes en sortie de chaque tube, reportées en Fig. 9.3.

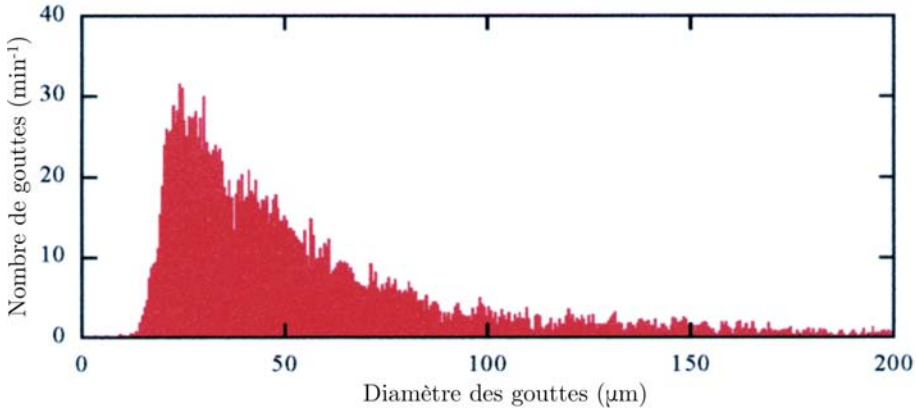

Figure 9.4 : *Distribution expérimentale de taille de gouttes en sortie du tube inférieur [143].*

Le spray est injecté à la même vitesse que le gaz, sur une ligne de 10 mm perpendiculaire à l'écoulement à la sortie du tube inférieur [1], avec la distribution de taille expérimentale, grâce à la méthode d'injection numérique d'une distribution discrète, détaillée en Chap. 5.2.

9.3.1.3 *Modélisation de la chimie n-heptane/air*

La résolution numérique des réactions chimiques est l'une des principales difficultés de la simulation d'un écoulement réactif. Le nombre d'espèces et de réactions élémentaires impliquées dans une oxydation est généralement très grand, ce qui induit un coût calcul important, chaque espèce devant être transportée spatialement. De plus, la raideur du système réactif implique de résoudre des échelles de temps et d'espace extrêmement petites, conduisant à de très petits pas de temps et un maillage très raffiné. De telles contraintes obligent à utiliser des descriptions simplifiées de la chimie, capables de ne rendre compte que d'un nombre limité de comportements spécifiques du mélange chimique. Les principales caractéristiques qu'un schéma simplifié doit pouvoir capturer, ont été résumées par Reveillon [170] (Fig. 9.5), auxquelles s'ajoutent une bonne prédiction du délai d'auto-allumage du mélange, et de l'émission de composés polluants (CO, NO_x, suies).

Une approche de simplification d'un schéma cinétique détaillé consiste à le réduire à ses principaux mécanismes, par diverses techniques numériques de réduction, récemment revues dans [134]. Cependant, pour les hydrocarbures lourds, le nombre d'espèces et de réactions dans le mécanisme ainsi réduit reste encore bien trop important pour être accessible à la simulation LES. A notre connaissance, pour la chimie n-heptane/air, le schéma le plus réduit disponible dans la littérature implique 65 espèces/315 réactions [192] et reste inenvisageable pour la LES d'une géométrie complexe.

1. Dans l'idéal, il aurait fallu simuler l'ensemble du tube inférieur, avec notamment le cône d'injection du spray, afin d'obtenir une distribution spatiale des gouttes à la sortie du tube inférieur qui soit la plus conforme à l'expérience.

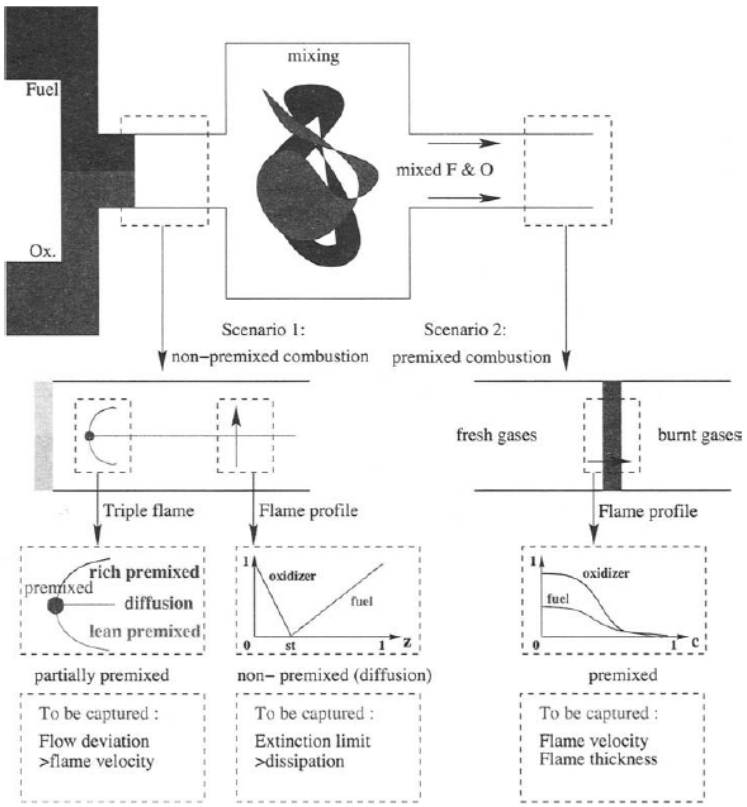

Figure 9.5 : *Schéma des différents comportements cinétiques que doit pouvoir décrire un modèle de cinétique chimique (extraits de [170]).*

Une autre approche consiste à compléter une réaction globale d'oxydation par quelques espèces et réactions supplémentaires (une ou deux réactions), permettant de reproduire les comportements principaux tels que la température et la vitesse de flamme. Les paramètres des réactions et des espèces sont calibrés par rapport au schéma détaillé. Le schéma à 2-3 réactions, d'un coût CPU très faible, ne permet de reproduire qu'un nombre limité de comportements de la chimie réelle, mais jugés suffisants pour notre étude.

Un schéma réduit à deux étapes pour la chimie n-heptane/air, nommé *2S_C7H16_DP*, est ainsi obtenu en suivant une méthodologie similaire à celle proposée par Franzelli *et al.* [73]. Le mécanisme cinétique inclut notamment l'oxydation du n-heptane en CO. Une réaction d'équilibre CO/CO_2 est introduite pour obtenir une température de gaz brûlés correcte en régime riche. De plus, une modulation du facteur pré-exponentiel de la formule d'Arrhénius en fonction de la richesse est appliquée, pour obtenir une bonne vitesse de flamme laminaire pour les mélanges riches, suivant la méthodologie de [72].

Les deux réactions de *2S_C7H16_DP* sont :

$$2\,C_7H_{16} + 15\,O_2 \rightarrow 14\,CO + 16\,H_2O \tag{9.2}$$

$$CO + 1/2\,O_2 \leftrightarrow CO_2 \tag{9.3}$$

Le taux de réaction des équations 9.2 et 9.3 s'écrivent selon la loi classique d'Arrhenius :

$$k_{f,1} = A_1 f_1(\Phi) \exp(-T_{a1}/T)[C_7H_{16}]^{n_f}[O_2]^{n_{O_2,1}}\,, \tag{9.4}$$

$$k_{f,2} = A_2 f_2(\Phi) \exp(-T_{a2}/T)[C_0]^{n_{CO}}[O_2]^{n_{O_2,2}}\,. \tag{9.5}$$

où A_i sont les facteurs pré-exponentiels, $T_{a,i}$ les températures d'activation, et n_i les ordres de réactions, fournis dans le tableau 9.1. La réaction 2 inverse est obtenu à travers la loi d'action des masses.

Tableau 9.1 : *Coefficients chimiques ajustés du schéma réduit 2S_C7H16_DP.*

	Réaction 1	Réaction 2
Facteur pré-exponentiel A_j	1.4×10^{11}	5.0×10^{9}
Température d'activation T_{aj}	29000 K	21000 K
Ordres de réaction	$n_f = 0.6$	$n_{CO} = 1$
	$n_{O_2,1} = 0.9$	$n_{O_2,2} = 0.5$

Les fonctions de correction des facteurs pré-exponentiels, qui permettent d'obtenir une prédiction correcte de la vitesse de flamme laminaire pour les mélanges riches [72], prennent la forme suivante :

$$f_1(\Phi) = \frac{2}{[1+\tanh(\frac{\Phi_{0,1}-\Phi}{\sigma_{0,1}})] + B_1[1+\tanh(\frac{\Phi-\Phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}})] + C_1[1+\tanh(\frac{\Phi-\Phi_{2,1}}{\sigma_{2,1}})]} \tag{9.6}$$

$$f_2(\Phi) = \frac{1}{2}[1+\tanh(\frac{\Phi_{0,2}-\Phi}{\sigma_{0,2}})] + \frac{B_2}{2}[1+\tanh(\frac{\Phi-\Phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}})] + \tag{9.7}$$

$$\frac{C_2}{2}[1+\tanh(\frac{\Phi-\Phi_{2,2}}{\sigma_{2,2}})] \times [1+\tanh(\frac{\Phi_{3,2}-\Phi}{\sigma_{3,2}})] \tag{9.8}$$

avec les paramètres d'ajustement fournis dans le tableau 9.2 :

Tableau 9.2 : *Coefficient des fonctions de correction PEA (Eqs. 9.6 et 9.8) pour 2S_C7H16_DP.*

	$\Phi_{0,j}$	$\sigma_{0,j}$	B_j	$\Phi_{1,j}$	$\sigma_{1,j}$	C_j	$\Phi_{2,j}$	$\sigma_{2,j}$	$\Phi_{3,j}$	$\sigma_{3,j}$
$j=1$	1.1635	0.0518	1.131	1.243	0.101	$1.2e^4$	1.494	0.0082	-	-
$j=2$	1.146	0.045	$1.5e^{-4}$	1.2	0.04	0.035	1.215	0.03	1.32	0.09

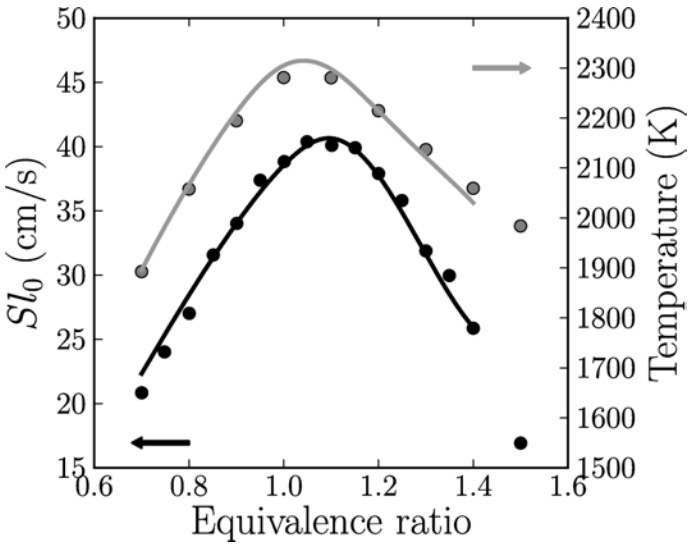

Figure 9.6 : *Validation du schéma réduit 2S_C7H16_DP. Symboles : chimie détaillée [192]. Ligne : 2S_C7H16_DP . Vitesse laminaire de flamme (noir), et température adiabatique de fin de combustion (gris).*

La précision du schéma cinétique réduit est évaluée pour des flammes prémélangées 1D, grâce au logiciel CANTERA [58]. Les résultats sont comparés à un schéma plus détaillé contenant 65 espèces/315 réactions [192], considéré comme la référence. Les résultats présentés Fig. 9.6 montrent que le schéma réduit reproduit convenablement la température adiabatique de fin de combustion, la composition des gaz brûlés et la vitesse de flamme laminaire, pour des richesses allant de 0.7 à 1.4, à pression et température ambiantes.

9.3.1.4 Comparaison avec l'expérience

Des vues instantanées de dégagement de chaleur sont comparés Fig. 9.7 entre les simulations *MuStARD* et *AS*, et l'expérience. Une structure de flamme similaire est visible dans les deux simulations : deux fronts de flammes plans, d'intensité variable englobe une zone de réaction locale autour des gouttes, qui sont représentées par des sphères. Un faible nombre de gouttes, généralement les plus grosses, arrive à traverser la flamme inférieure. Lorsque les gouttes sont colorées en blanc dans le cas *MuStARD* ($I_{LW} = 1$), les gouttes sont en mode E. Ce mode s'active majoritairement après le passage au travers de la flamme inférieure. Les gouttes pénètrent dans le flux à contre courant d'oxygène en ralentissant progressivement et voient leur temps de résidence augmenter dans cette zone. La quasi-totalité des gouttes s'est évaporée avant le front de flamme supérieur. Dans la zone entre les deux fronts de flamme, on observe des intensités de dégagement de chaleur localement différentes autour des gouttes, avec quelques points très marqués en dégagement de chaleur dans la simulation *AS* et un dégagement plus réparti sur l'ensemble des gouttes avec *MuStARD*.

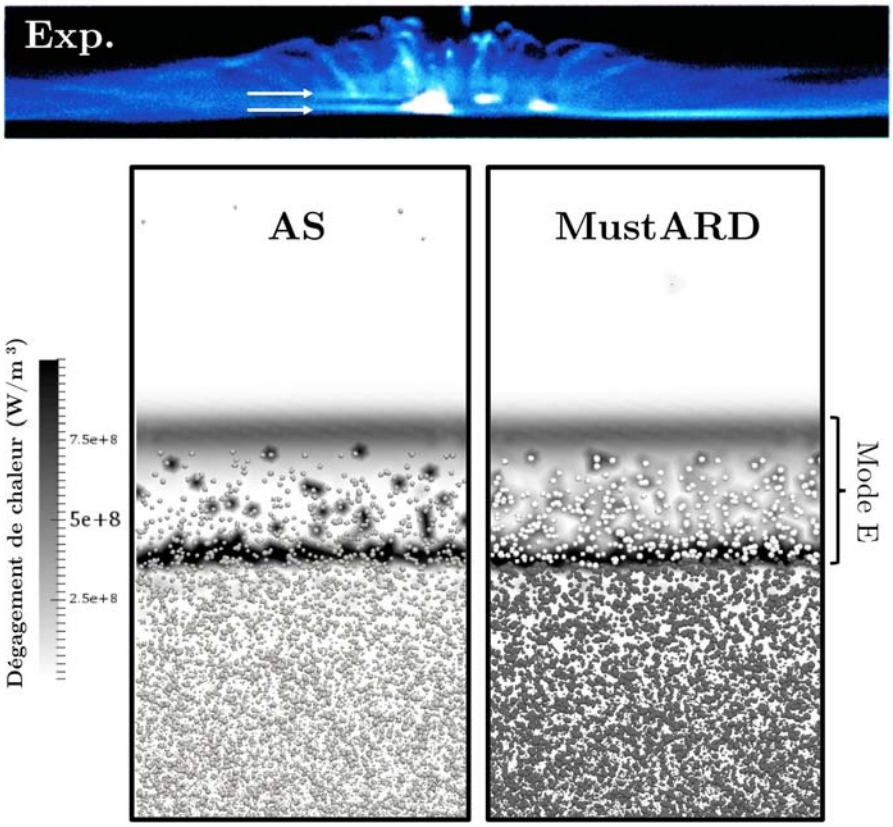

Figure 9.7 : *Flamme à contre-courant de Mikami et al.. Haut : photographie dans l'expérience de la flamme avec un temps de pose de 33 ms (extrait de [143]). Bas : champs instantanés de dégagement de chaleur total proche de l'axe de symétrie pour les simulations MuStARD et AS, dans le cas avec oxygène pur [143]. Les gouttes sont superposées et sont colorées selon leur état V (gris) ou E (blanc) dans la simulation MuStARD.*

Si l'on compare ces simulations à l'image obtenue dans l'expérience (Fig. 9.7, haut), plusieurs similarités sont observables. Tout d'abord, il y a présence d'une zone de réaction forte en bas dans l'expérience et d'un deuxième front de flamme légèrement au dessus. De plus, on observe sur l'image la trace moyennée de l'émission des flammes localisées autour des gouttes en combustion isolée, régime bien capté par le modèle *MuStARD*. En revanche, au vu du manque de données expérimentales quantitatives, la comparaison ne permet pas de complètement valider le modèle *MuStARD*.

Une analyse de la structure de flamme est proposée dans la suite. Les profils moyens obtenus avec les deux simulations *MuStARD* et *AS* sur l'axe de symétrie sont illustrés Fig. 9.8. Les gouttes, injectées à gauche [2] en Fig. 9.8, commencent à s'évaporer en l'absence d'oxygène (Fig. 9.8 b. et c.). Une première flamme de diffusion intense se stabilise au point stoichiométrique entre ce carburant pré-évaporé à gauche et l'oxygène pur arrivant par la droite (Figs. 9.9 et 9.8 c.). L'essentiel du

2. L'axe vertical de la configuration est disposé horizontalement, la gauche correspondant au tube inférieur.

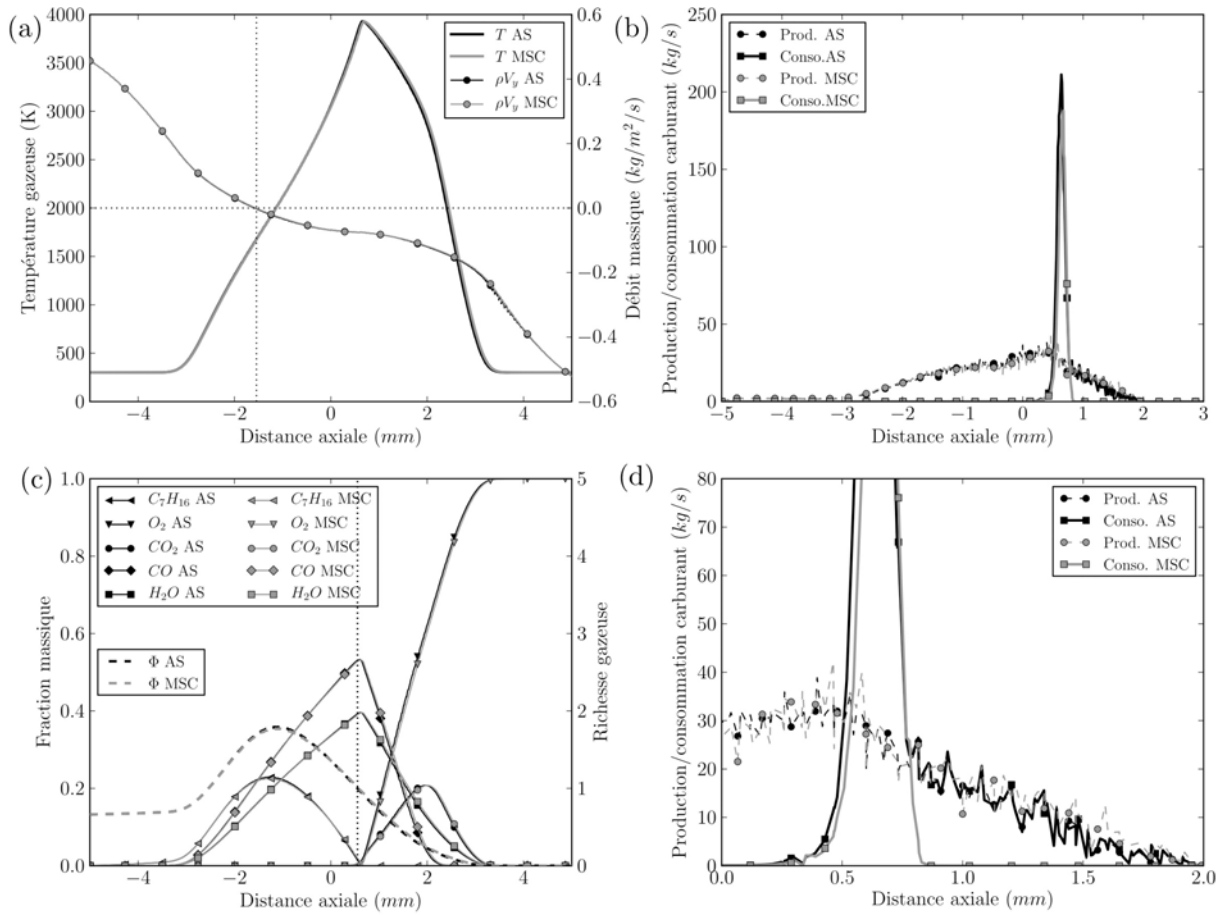

Figure 9.8 : *Flamme 2D à contre-courant [143] : moyenne temporelle des profils sur l'axe pour les simulations MuStARD et AS. (a) Température et vitesse ; (b) Production et consommation de vapeur de carburant ; (c) Fractions massiques d'espèces et richesse ; (d) Agrandissement de (b).*

carburant pré-évaporé a été consommé après cette flamme, qui est très similaire dans les deux modèles. Cette première flamme est suivie d'une zone de réaction étalée, également similaire pour les deux modèles, en terme de dégagement de chaleur total, mais montrant une différence notable de comportement. Dans la simulation AS, le taux de réaction consomme instantanément le carburant évaporé et mélangé à l'oxygène (Fig. 9.8 d.). Ainsi, l'évaporation pilote une combustion prémélangée. Du fait de la température très élevée dans cette flamme d'oxygène pur (Fig. 9.8 a.), la réaction est très rapide et il n'y a pas d'accumulation dans cette zone (Fig. 9.8 c.). Dans le modèle $MuStARD$, les gouttes s'auto-allument lorsqu'elles traversent la première flamme de diffusion, puis fournissent directement un taux de dégagement de chaleur ((Fig. 9.9). Le taux de consommation de carburant est lui aussi égal au taux d'évaporation par construction du modèle de combustion de goutte isolée (Sect. 8.2.5.2). En Fig. 9.9, on remarque que le taux de dégagement de chaleur de la phase gazeuse, dans le modèle $MuStARD$, est négatif, mais que la somme de ce dégagement avec celui issu des gouttes en mode E est similaire au dégagement de chaleur total du modèle AS.

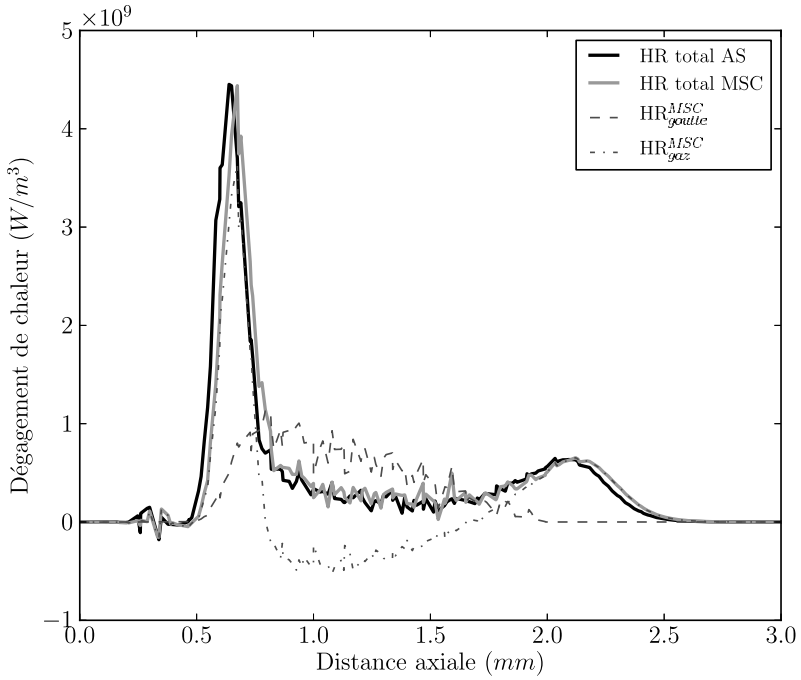

Figure 9.9 : *Flamme 2D à contre-courant de Mikami et al. [143] : profils de dégagement de chaleur sur l'axe pour les modèles MuStARD et AS.*

Ce phénomène propre à *MuStARD* s'explique par le fait que le modèle *MuStARD* fait l'hypothèse d'une réaction globale à une étape, ne prenant pas en compte l'équilibre $CO - CO_2$, comme cela est fait avec la chimie réduite *2S_C7H16_DP*. La combustion de goutte isolée produit, dans cette zone, une quantité importante de CO_2, qui se dissocie ensuite en CO grâce à la réaction 2 (Eq. 9.3). Cette réaction est endothermique dans ce sens, ce qui explique la présence d'un dégagement de chaleur négatif. Après cette zone intermédiaire, on observe un deuxième front de flamme (Fig. 9.9), purement gazeux et moins intense en terme de dégagement de chaleur, qui correspond à une zone d'oxydation du CO gazeux, produit dans le premier front de flamme et dans la zone intermédaire. En Fig. 9.8 a., on voit également que le point de stagnation est situé à -1,6 mm, c'est à dire plus proche du tube inférieur, et que la flamme principale se stabilise sur la ligne stoichiométrique, qui est coté oxygène, puisque la richesse globale est pauvre.

Enfin, le dégagement de chaleur est intégré le long de l'axe. La puissance obtenue dans la simulation *AS* est 27,8 kW. Dans la simulation *MuStARD*, la puissance est identique (27,6 kW), mais se répartit entre les contributions de la combustion de gouttes isolées (13,6 kW) et combustion gazeuse (14,0 kW). La combustion de goutte isolées contribue donc pour moitié au taux de dégagement de chaleur total le long de l'axe.

Hormis la différence dans la formation du dégagement de chaleur, les deux modèles fournissent des solutions tout à fait identiques, en terme de position de flamme, de puissance totale obtenue

par combustion, et de profils de température, vitesse et espèce. L'écart très faible observé sur les résultats des deux modèles, dans ce cas particulier, s'explique notamment par le fait que les modèles d'évaporation et de combustion isolée sont très proches pour une température ambiante supérieure à 3500 K, comme c'est le cas ici. En effet, une goutte s'évaporant dans un environnement extrêmement chaud, a une évolution relativement similaire à une goutte en combustion dans le même environnement. Le cas expérimental utilisé ici s'avère donc peu discriminant. C'est pourquoi un cas plus réaliste en termes de conditions de fonctionnement d'une chambre de combustion, est proposé dans la suite.

9.3.2 Flamme contre-courant diphasique en condition de fonctionnement type moteurs aéronautiques

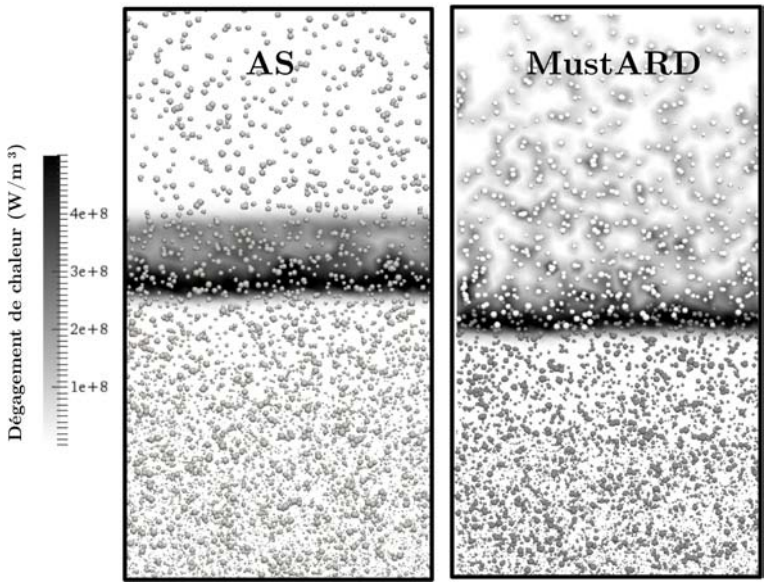

Figure 9.10 : *Flamme 2D à contre-courant AIR : champs instantanés de dégagement de chaleur totale proche de l'axe de symétrie pour les simulations MuStARD et AS, dans le cas avec injection d'air. Les gouttes sont superposées et sont colorées selon leur état V (gris) ou E (blanc) dans la simulation MuStARD.*

Afin d'analyser le comportement du modèle *MuStARD* dans un régime plus proche des régimes obtenus dans une chambre de combustion industrielle, notamment en termes de température, l'expérience précédente est reprise et modifiée de la façon suivante : l'injection d'oxygène est remplacée par une injection d'air à température ambiante, et le débit de carburant liquide est adapté pour conserver une richesse globale équivalente au cas précédent proche de la stœchiométrie. De plus, géométrie et taux d'étirement sont conservés. On désignera cette flamme par flamme *AIR*.

Ces nouvelles conditions permettent d'obtenir des différences de comportement plus marquées entre les deux modèles. Premièrement, sur les champs instantanés de dégagement de chaleur (Fig. 9.10), un seul front de flamme apparait, mais ne se stabilise pas à la même position entre simu-

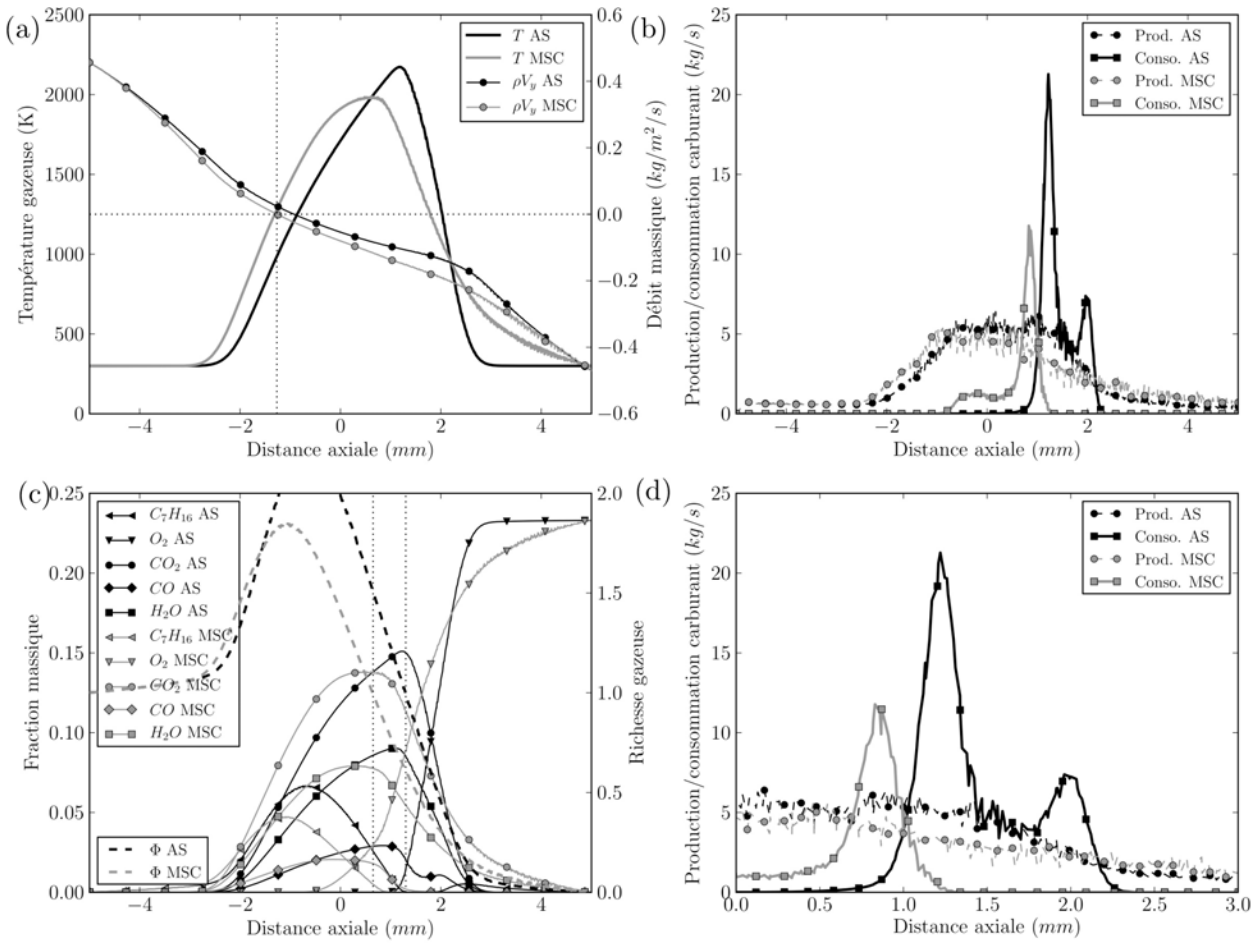

Figure 9.11 : *Flamme 2D à contre-courant AIR : moyenne temporelle des profils sur l'axe pour les simulations MuStARD et AS. (a) Température et vitesse ; (b) Production et consommation de vapeur de carburant ; (c) Fractions massiques d'espèces et richesse ; (d) Agrandissement de (b).*

lation *MuStARD* et *AS*. De plus, au dessus de cette flamme, le dégagement de chaleur disparait rapidement dans la simulation *AS*, tandis qu'il se maintient autour des gouttes en mode E, dans le modèle *MuStARD*. Dans les deux cas, les gouttes de grandes tailles arrivent à remonter l'écoulement et atteignent le tube supérieur, qui injecte de l'air. La comparaison des profils obtenus sur l'axe de symétrie permettent d'analyser en détail le comportement des deux modèles (Fig. 9.11). Dans le cas *AS*, un premier front de flamme de diffusion très marqué se stabilise à gauche (Figs. 9.11 et 9.12) en consommant le carburant pré-évaporé dans la zone de préchauffage, suivie d'une courte zone où le taux de consommation est piloté par le taux d'évaporation, puis d'une zone d'oxydation du CO. A droite de cette zone de réaction, la température décroit très vite, du fait de l'arrivée d'air frais, ce qui ralentit très fortement le taux d'évaporation et le taux de consommation associé, qui devient quasiment nul. Dans le cas *MuStARD*, on observe également une première flamme de diffusion, dans laquelle les gouttes s'auto-allument. La réaction au niveau des gouttes

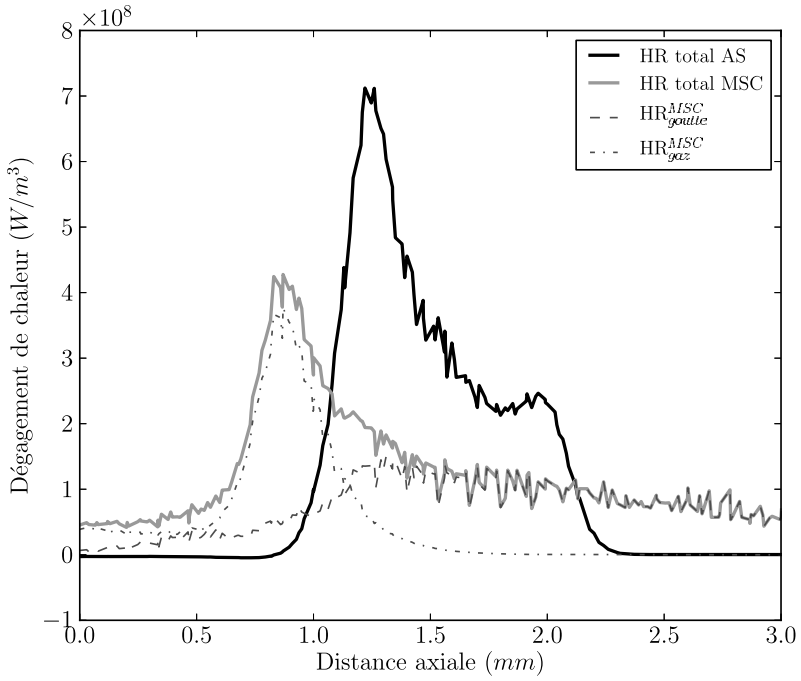

Figure 9.12 : *Flamme 2D à contre-courant AIR : profils de dégagement de chaleur sur l'axe pour les modèles MuStARD et AS.*

prend ensuite progressivement le relais après la première flamme (Fig. 9.12), et maintient un taux de dégagement de chaleur et d'évaporation significatif, même dans l'écoulement d'air froid, puisque la réaction reste activée au niveau de la goutte, grâce au modèle *MuStARD*. Le critère d'extinction ne s'active pas puisque ce sont essentiellement les gouttes de grand diamètre qui arrivent à survivre jusqu'à cette zone post-flamme. La position du point stœchiométrique, et donc de la flamme, est également différente entre les deux modèles, ainsi que la position du plan de stagnation.

La structure de flamme est analysé dans l'espace "Richesse - Température gazeuse" en Fig. 9.13. La position du nuage de points est typique d'une structure de flamme de diffusion diphasique (repliement dans la partie riche, du fait de la transformation progressive du carburant liquide en vapeur). On observe un léger décalage entre les deux simulation, lié principalement à l'émission moins importante de CO dans le modèle *MuStARD* (Fig. 9.11 c.).

En terme de puissance intégrée le long de l'axe, le modèle *AS* prédit une puissance de 8,4 kW tandis ce que le modèle *MuStARD* prédit une puissance de 10,7 kW, réparti équitablement entre combustion gazeuse (5,4 kW) et combustion de goutte isolée (5,3 kW). Le modèle *MuStARD* génère donc une consommation plus importante du carburant liquide injecté, puisque le modèle maintient la combustion autour des gouttes isolées dans la zone de dilution. Cette différence de premier ordre montre l'un des apports principaux de l'utilisation du modèle *MuStARD*, permettant notamment de maintenir une réaction dans une zone de post-flamme fortement diluée par un écoulement froid.

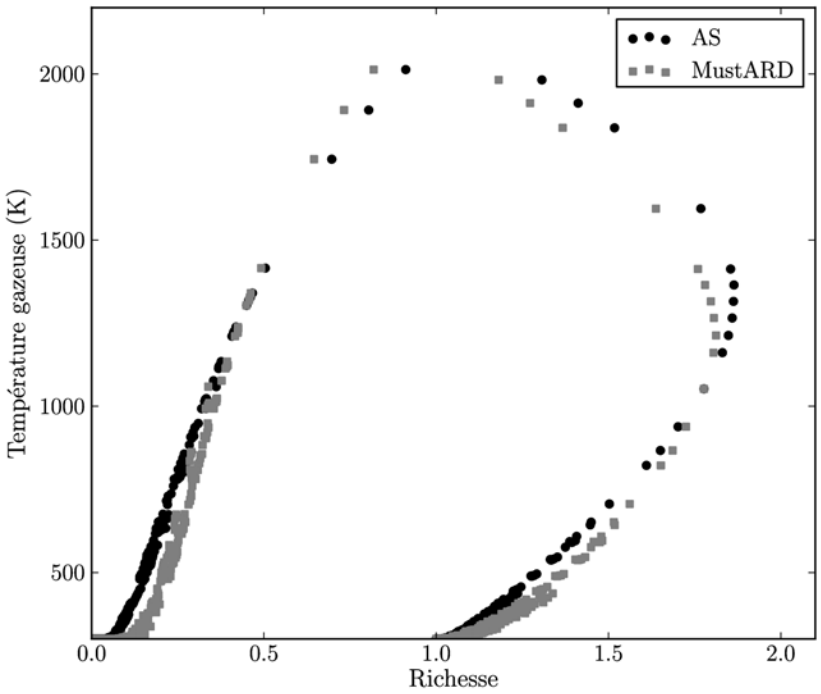

Figure 9.13 : *Flamme AIR : structure de flamme dans un diagramme Richesse - Température gazeuse.*

9.4 Conclusions sur ce chapitre

Le modèle *MuStARD* a été étudié et validé dans trois situations de complexité croissante, et comparé à l'expérience et à une simulation avec modèle d'évaporation seul, classiquement utilisé (Abramzon-Sirignano). Le modèle *MuStARD* introduit généralement un temps de vie des gouttes plus court et un dégagement de chaleur total plus important. Malheureusement, peu de données expérimentales quantitatives pour la validation de ces cas sont aujourd'hui disponibles.

Il est maintenant possible de passer à l'application du modèle *MuStARD* dans une configuration complexe, intégrant notamment un écoulement turbulent, afin d'observer les modifications de comportement de la flamme associées à la prise en compte du régime de combustion de goutte isolée. Cette étude fait l'objet de la partie suivante (Chaps. 10 à 12).

Cinquième partie

Application à la combustion turbulente d'un spray

Contexte de l'étude

Une validation expérimentale sur une configuration complexe est proposée dans cette partie. Le choix de l'expérience est principalement dicté par l'application industrielle visée, avec une injection directe similaire à un dispositif industriel usuel, une stabilisation de la flamme par écoulement tournant (sans flamme pilote), une flamme confinée dans une chambre, si possible sous pression, et qui présente une forte interaction spray/combustion. De plus, afin d'effectuer une simulation la plus proche du réel, les conditions aux limites de la configuration doivent être particulièrement bien décrites. Enfin, pour valider les résultats de simulation, notamment en termes de structure du spray et de la flamme, des mesures qualitatives et quantitatives doivent être disponibles. Pour ces raisons, le choix de la configuration s'est porté sur un dispositif expérimental conçu par l'Université de Cambridge [32].

Dans le chapitre 10, le dispositif expérimental et la configuration numérique de la simulation sont détaillées. Dans le chapitre 11, une comparaison entre mesures et simulations est présentée, pour le modèle d'évaporation d'Abramzon-Sirignano. Cette simulation sera dénommé AS, comme dans les précédents chapitres. Enfin, dans le dernier chapitre, le modèle $MuStARD$, développé au cours de la thèse, est appliqué et comparé à la simulation AS.

Chapitre 10

Configuration de calcul et mise en oeuvre numérique

Sommaire

10.1 Présentation de la configuration 197
10.2 Mise en oeuvre de la simulation 199
10.2.1 Maillage et conditions aux limites 199
10.2.2 Comportement de la chimie réduite 2S_C7H16_DP pour la combustion laminaire non-prémélangée 201
10.2.3 Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée 202

10.1 Présentation de la configuration

La géométrie du brûleur diphasique de Cambridge [32] consiste en une veine cylindrique verticale de 350 mm de long débouchant sur une chambre de combustion rectangulaire dont les parois sont en quartz de qualité optique, et ouverte sur l'atmosphère (Fig. 10.1). Six ailettes placées dans la veine, inclinées de 60° par rapport à l'axe de la veine, impriment à l'écoulement froid entrant, un fort mouvement de rotation. A l'intérieur du conduit interne de la veine est placé un injecteur pressurisé, générant un spray en forme de cône creux de 80° d'ouverture, injecté directement dans la chambre, au centre de l'injection d'air. Le carburant liquide est du n-heptane (C_7H_{16}), choisi notamment pour sa volatilité importante par rapport au kérosène, ce qui permet à la flamme de se stabiliser sans avoir besoin de préchauffer l'air entrant. Le point de fonctionnement choisi parmi les différents points de fonctionnement mesurés dans [204], noté SWH1, correspond à un débit d'air entrant de 500 L/s à température ambiante et pression atmosphérique. La vitesse moyenne d'entrée du flux d'air est d'environ 14,8 m/s. Le débit de carburant liquide associé est 0.12 g/s,

et correspond à une richesse globale de la chambre de 0.17, permettant d'obtenir une flamme compacte autour du spray (Fig. 10.2).



Figure 10.1 : *Image du brûleur de Cambridge [32].*



Figure 10.2 : *Image de la flamme obtenue pour le point de fonctionnement SWH1 [204] (extrait de [32]).*

Grâce aux parois transparentes de la chambre, des mesures optiques non intrusives sont possibles. Les vitesses axiales et tangentielles de la phase gazeuse sont mesurées à l'aide d'une méthode

LDA (cf. Sect 2.4), à différentes hauteurs dans la chambre, pour les cas réactifs et non-réactifs. Les résultats LDA étant perturbés par la présence des gouttes, la mesure de vitesse gazeuse n'est valide qu'en dehors de la région du spray. La position du spray est évaluée qualitativement via une mesure par diffusion de Mie des gouttes. La position du front de flamme est évaluée par une mesure LIF planaire du radical OH (OH-PLIF). La vitesse des gouttes est aussi mesurée [31] à différentes hauteurs. Enfin, des mesures d'émission de certaines espèces (NO_x, CO, hydrocarbure résiduel) sont effectuées en différents points, le long d'une ligne à la sortie de la chambre de combustion.

10.2 Mise en oeuvre de la simulation

10.2.1 Maillage et conditions aux limites

La géométrie simulée inclut notamment le tube et les ailettes, afin de laisser la turbulence se développer naturellement dans le conduit d'entrée (Fig. 10.3). Ce choix, nécessitant de calculer l'écoulement à l'intérieur du conduit, permet d'éviter d'imposer une valeur d'intensité turbulente à priori non connue à l'entrée de la chambre. Une grand demi-sphère est ajoutée à la sortie de la chambre afin de mimer le comportement de l'atmosphère environnante et limiter l'influence des conditions aux limites de sortie (non montré sur la figure).

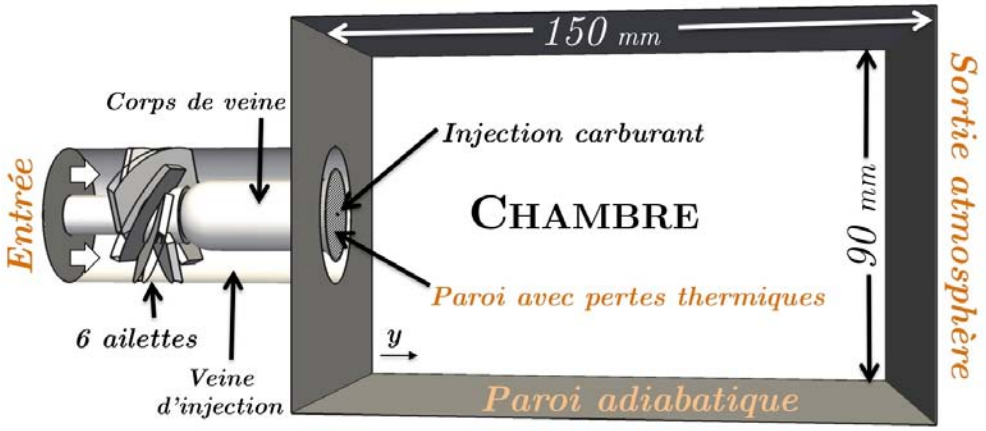

Figure 10.3 : *Géométrie et conditions aux limites de la simulation. La chambre débouche sur une demi-sphère de grande taille (non montrée).*

Un maillage est construit à partir de cette géométrie, contenant 19 millions de cellules, illustré en Fig. 10.4. La résolution du maillage LES est évaluée *a posteriori* par le rapport entre échelle turbulente de Kolmogorov et la taille locale de la cellule de maillage, qui doit être de l'ordre de 10^{-1} pour une LES convenable. L'échelle turbulente dans la zone de la flamme est estimée par échelle de Kolmogorov de l'ordre de $[10^{-4}, 10^{-2}]$ mm grâce aux formules suivantes :

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \tag{10.1}$$

avec le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ϵ estimé *a posteriori* par

$$\epsilon = 2\nu S_{ij} S_{ij} \tag{10.2}$$

où ν est la viscosité cinématique du fluide et le tenseur de déformation du fluide $S = \frac{1}{2}[\nabla \overrightarrow{u} + \nabla \overrightarrow{u}^T - tr(\nabla \overrightarrow{u})/3 * I]$.

Dans le cas présent, afin de permettre à la turbulence de se développer correctement et d'être transportée avec un minimum de dissipation numérique le long du conduit, la taille des cellules dans cette zone est maintenue très petite ($\eta_k/\Delta x \sim 0.5$ soit $\Delta x \sim 0.2mm$). En aval, le maillage est progressivement dé-raffiné, $\eta_k/\Delta x$ variant de 0.5 à 0.1 (Fig. 10.4). Les plus petites structures turbulentes ne sont donc pas résolues, mais sont modélisées par le modèle de sous-maille décrit en Sect. 3.4 (WALE [155]). Des conditions aux limites caractéristiques sont utilisées pour décrire l'entrée et la sortie [161].

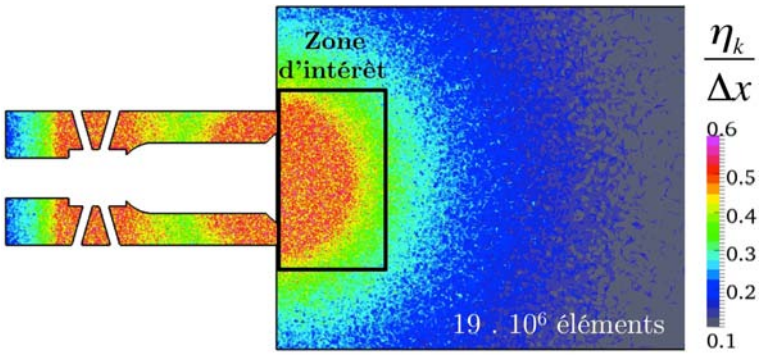

Figure 10.4 : *Coupe médiane du maillage, coloré par le rapport $\eta_k/\Delta x$.*

Les parois sont des murs adiabatiques non glissants, hormis la surface immergée dans le jet d'air (Fig. 10.3), pour laquelle des pertes thermiques sont imposées, conformément à ce qui est observé sur l'expérience. En effet, cette surface très proche d'une zone très chaude génère un flux thermique important. D'après l'expérience, le flux thermique est estimé par $(T_{g,paroi} - T_{solide}) \times R_h$ où $T_{g,paroi}$ est la température du gaz à la paroi, $T_{solide} = 400\ K$ est la température estimée du solide et $R = 6.7\ m^2/K/W$ est la résistance thermique. Ces paramètres introduisent cependant une incertitude dans la simulation, dont l'impact sera analysé en Sect. 11.3.1.

L'injection liquide se fait à travers un modèle d'injecteur appelé FIMUR [104], qui permet d'introduire un spray atomisé, sous la forme d'une cône creux issu d'un injecteur pressurisé. L'angle du cône est obtenu en analysant les images de diffusion de Mie du spray expérimental (cône de 80°). Le spray suit une distribution de taille de type Rosin-Rammler (Eq. 10.3), qui s'étend de 1 μm à 100 μm, avec un paramètre d'étalement q de 2.5 et un diamètre moyen de Sauter (SMD) de $d_p^{SMD} = 40\ \mu m$, évalués d'après les caractéristiques de l'injecteur fournit par le fabricant (Fig. 10.5) :

$$RR(d_p) = q \frac{d_p^{q-1}}{X^q} exp\left[-\left(\frac{d_p}{X}^q\right)\right] \tag{10.3}$$

avec

$$X = \frac{\Gamma(1+2/q)}{\Gamma(1+3/q)} d_p^{SMD} \tag{10.4}$$

où Γ est la fonction gamma usuelle.

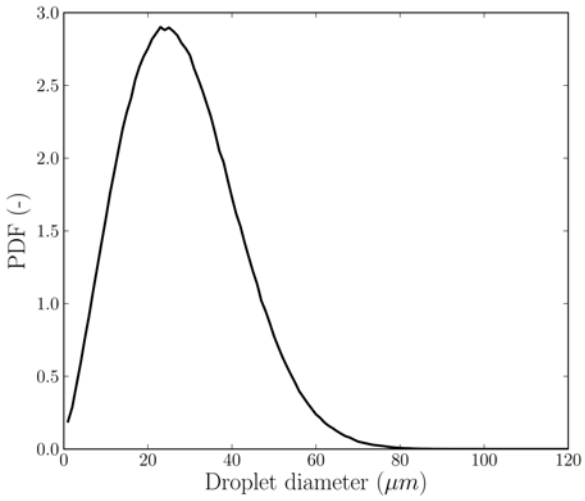

Figure 10.5 : *Distribution de taille du spray à l'injection, suivant un fonction Rosin-Rammler ($SMD = 40$ μm et $q = 2.5$).*

10.2.2 Comportement de la chimie réduite 2S_C7H16_DP pour la combustion laminaire non-prémélangée

Afin de vérifier la validité du schéma réduit présenté en Sect. 9.3.1.3, le comportement du schéma est préalablement analysé pour des flammes laminaires non-prémélangées étirées dans un écoulement contre-courant, obtenu grâce au logiciel CANTERA [58], et comparées au schéma détaillé [192] pour différents niveaux d'étirement. Les conditions d'injection de la configuration à contre-courant, détaillées dans le tableau 10.1, ont été choisies pour être représentatives des conditions moyennes vues par la flamme dans le brûleur étudié. En effet, comme on le verra dans la suite, le spray liquide est injecté dans une zone pauvre en oxygène mais chargé en produits de réaction chaud. Afin d'obtenir une situation analogue dans un écoulement contre-courant purement gazeux, les conditions coté carburant sont pris *a posteriori* sur les champs gazeux, en un point arbitraire situé dans la zone chaude, au coeur du spray.

Les résultats pour la chimie réduite et la chimie détaillée sont comparés en Fig. 10.6, en termes de taux de dégagement de chaleur intégré au travers du front de flamme. Pour les flammes non-prémélangées, le dégagement de chaleur intégré est la principale information, puisque ces flammes n'ont pas de caractéristiques globales comme en prémélange (épaisseur, vitesse...). L'ordre de grandeur du dégagement de chaleur et l'allure de la courbe en fonction de l'étirement sont raisonna-

Tableau 10.1 : *Données d'entrée pour les flammes laminaire contre-courant. Température et fractions massiques des espèces.*

	Côté heptane	Côté a
T	1200 K	300 K
N-heptane	27%	0%
O_2	0%	23%
N_2	52%	77 %
Gaz brûlés	21%	0%

blement bien prédits par la chimie réduite dans la plage d'étirement considéré, avec un écart augmentant avec le taux d'étirement. Les résultats présents sont considérés suffisamment précis pour notre étude, en l'absence d'une modélisation plus rigoureuse.

10.2.3 Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée

Dans la configuration étudiée ici, la flamme est principalement de type non-prémélangé, comme on le verra dans la suite (Fig. 11.12). La combustion turbulente non-prémélangée fait apparaître des comportements différents par rapport à une combustion turbulente prémélangée, et nécessite de ce fait un traitement particulier.

10.2.3.1 Comportements particuliers de la combustion turbulente non-prémélangée

La théorie des flammes de diffusion [1] laminaires étirées [162] permet d'obtenir ses principales caractéristiques. Cette théorie montre notamment que, loin de l'étirement d"extinction, la structure de ces flammes est pilotée par le taux de dissipation scalaire χ défini comme :

$$\chi = 2\mathcal{D}_{mix}(\nabla Z)^2 \tag{10.5}$$

où $\mathcal{D}_{mix}$ est le coefficient de diffusion du mélange et Z la fraction de mélange au sens de Bilger [18] :

$$Z = \frac{\beta - \beta_{Ox}}{\beta_F - \beta_{Ox}} \tag{10.6}$$

$$\beta = \sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{\alpha_{C,i}}{m} + \frac{\alpha_{H,i}}{n} + \frac{\alpha_{O,i}}{m + n/4} \right) \frac{Y_i}{W_i} \tag{10.7}$$

où N_s est le nombre d'espèces, $\alpha_{l,i}$ le nombre d'atomes l de l'espèce i, pour le carburant C_mH_n. β_{Ox} et β_F désignent respectivement la valeur de β à l'entrée d'air (air pur) et à l'entrée carburant (carburant pur). Z est un scalaire passif, solution d'une équation sans terme source. Le taux de

1. ou "non-prémélangée"

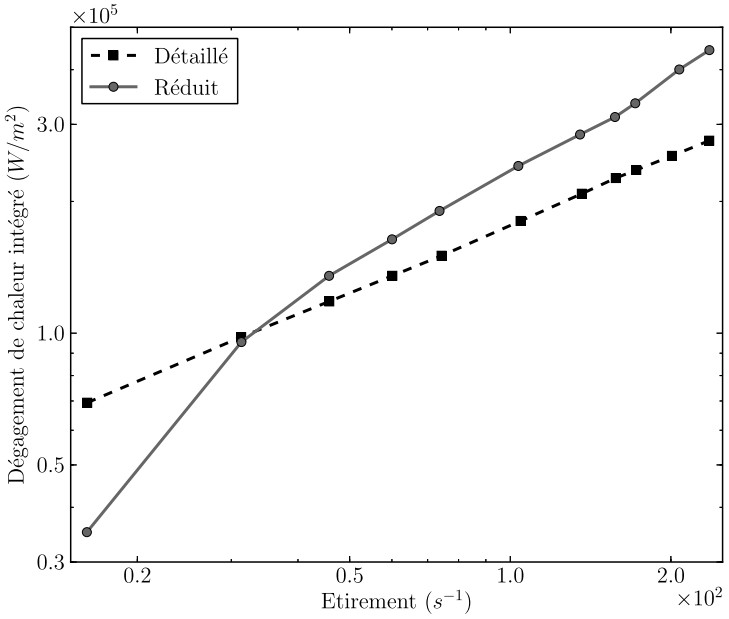

Figure 10.6 : *Comparaison du dégagement de chaleur intégré au travers du front de flamme sur l'axe, en fonction du taux d'étirement imposé, pour la chimie réduite et détaillée dans la configuration de flamme de diffusion étirée à contre-courant.*

consommation de carburant dans le cas d'une flamme étirée à contre courant est proportionnel à la racine du taux de dissipation scalaire évalué à la stœchiométrie χ_{st} :

$$\Omega_F = -\rho \frac{Y_F^0}{1 - Z_{st}} \sqrt{\mathcal{D}_{mix} \chi_{st}} \tag{10.8}$$

où Y_F^0 est la fraction massique de carburant imposée coté injection de carburant. Toujours dans ce même cas, le taux de dissipation scalaire évalué au point stoechiométrique χ_{st} est directement proportionnel à l'étirement imposé par l'écoulement contre courant :

$$a = \pi \chi_{st} \exp[2(\mathrm{erf}^{-1}(1 - 2Z_{st}))^2] \tag{10.9}$$

Ainsi, dans le cadre simplifié de cette théorie, on montre que la puissance d'une flamme de diffusion est directement piloté par l'étirement qui lui est imposé.

De plus, la flamme de diffusion n'a pas d'épaisseur caractéristique intrinsèque contrairement à une flamme de prémélange. L'épaisseur de la flamme de diffusion est contrôlée par l'écoulement. Dans le cadre de la théorie laminaire, on obtient une estimation de l'épaisseur de la flamme étirée $l_{\mathcal{D}}$, à partir de χ_{st} :

$$l_{\mathcal{D}} \approx \sqrt{\frac{\mathcal{D}_{mix}}{\chi_{st}}} \tag{10.10}$$

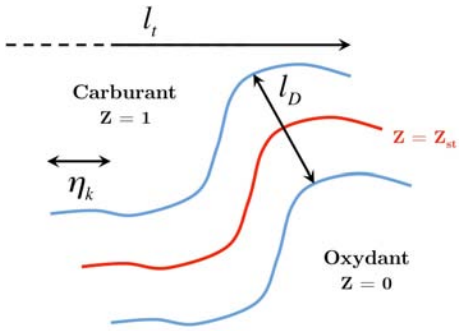

Figure 10.7 : *Echelles caractéristiques d'une flamme turbulente non prémélangée.*

Enfin, on définit un nombre de Damkhöler $\mathcal{D}_a$ spécifique à la flamme de diffusion, qui correspond au rapport entre temps caractéristiques de l'écoulement τ_{fl}, pris égal à $1/\chi_{st}$) et de la chimie τ_c :

$$\mathcal{D}_a^{fl} = \frac{1}{\chi_{st}\tau_c} \tag{10.11}$$

La flamme existe tant que le temps caractéristique de l'écoulement est plus grand que celui de la chimie ($\mathcal{D}_a >> 1$). Plus τ_{fl} se rapproche de τ_c, moins la chimie a le temps de consommer les réactifs et l'on se rapproche de l'extinction. La théorie asymptotique de Liñan [130] permet notamment d'obtenir une évaluation du Damkhöler d'extinction $\mathcal{D}_a^{ext}$.

10.2.3.1.1 Flamme de diffusion et turbulence

Lorsque l'écoulement est turbulent, le front de flamme de diffusion est soumis à des variations intenses de l'étirement, qui modifient fortement sa structure. La figure 10.7 schématise les différentes échelles caractéristiques d'une flamme non prémélangée turbulente, où l_t correspond à l'échelle intégrale de la turbulence et η_k l'échelle de Kolmogorov. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, l'étirement maximal et le plus petit temps caractéristique du fluide correspondent à l'échelle de Kolmogorov :

$$a(\eta_k) = \frac{1}{\tau(\eta_k)} \tag{10.12}$$

Le temps caractéristique associé à l'échelle intégrale l_t peut être évalué par :

$$\tau_t = \frac{l_t}{u'} \tag{10.13}$$

où u' est la fluctuation de vitesse turbulente. Ces deux temps caractéristiques du fluide permettent d'évaluer deux valeurs du nombre de Damkhöler :

$$\mathcal{D}_{a_k} = \frac{\tau(\eta_k)}{\tau_c} = \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}}\frac{1}{\tau_c} \tag{10.14}$$

$$\mathcal{D}_{a_t} = \frac{\tau(l_t)}{\tau_c} = \frac{l_t}{u'\tau_c} \tag{10.15}$$

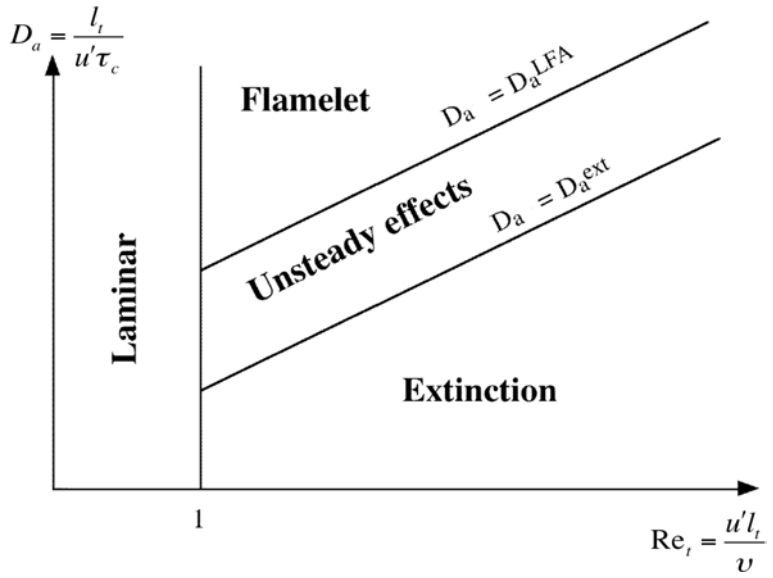

Figure 10.8 : *Diagramme de combustion non-prémélangée turbulente en fonction du nombre de Damköhler et du nombre de Reynolds turbulent en échelle log-log (adapté de [162]).*

Noter que ces deux nombres sont liés par la relation $\mathcal{D}_{a_\mathbf{t}} \approx \sqrt{\mathcal{R}_{e_t}}\mathcal{D}_{a_\mathbf{k}}$ où $R_{e_t} = u'l_t/\nu$.

De la même manière que pour les flammes prémélangées, plusieurs études ont cherché à construire des diagrammes de régime de combustion en fonction du nombre de Damkhöler et du nombre de Reynolds turbulent $\mathcal{R}_{e_t}$ [52, 202]. En simplifiant, ces études mettent en évidence quatre régimes de combustion non-prémélangée, schématisé dans le diagramme de la Fig. 10.8 :

- Pour les cas où $\mathcal{R}_{e_t} < 1$, on se place dans un cas laminaire.
- Lorsque le temps chimique est très petit (grand $\mathcal{D}_{a_\mathbf{t}}^{fl}$), la flamme peut supporter des étirements à l'échelle de Kolmogorov en gardant une structure proche d'une flamme laminaire (régime de "flamelettes"). On introduit le nombre de Damköhler $\mathcal{D}_a^{LFA}$ qui exprime la limite de l'hypothèse de flammelette. Dans ce régime, on doit avoir $\mathcal{D}_{a_\mathbf{t}}^{fl} > \mathcal{D}_a^{LFA}$. De plus, l'épaisseur de diffusion minimale de la flamme est alors proche de l'échelle de Kolmogorov : $l_{d,min} \approx \eta_k$.
- Lorsque τ_c augmente, les petites structures de la turbulence entrainent des effets instationnaires à l'intérieur de la zone de réaction.
- Lorsque τ_c augmente encore, la flamme peut s'éteindre ($\mathcal{D}_{a_\mathbf{k}}^{fl} \approx \mathcal{D}_a^{ext}$).

Les petites structures turbulentes, non résolues en LES, ont donc une influence variable sur la flamme de diffusion étirée, ne nécessitant pas nécessairement de modèle de combustion turbulente pour être bien captée en LES. Dans le cadre de cette simulation LES bien résolue, la nécessité d'un modèle de combustion est évaluée, en s'appuyant sur les résultats d'un modèle de combustion turbulente non-prémélangée développé par Rocchi [175]. Il s'agit d'une extension de la formulation de flamme épaissie prémélangée aux cas non prémélangés, en prenant en compte les propriétés particulières des flammes non-prémélangées.

Le modèle proposé par Rocchi [175] vise à obtenir sur un maillage LES, le bon taux de dégagement de chaleur d'une flamme de diffusion, même si la flamme simulée est sous résolue par rapport à la flamme réelle. Un taux d'épaississement F est défini pour épaissir le front de flamme sous-résolue, et prend la forme suivante :

$$F = \left(\frac{\Delta x}{\eta_k}\right)^{2/3} = \sqrt{\frac{\Delta x \; u'_{\Delta x}}{\nu}} \tag{10.16}$$

où Δx est la taille locale de cellule du maillage et $u'_{\Delta x}$ une estimation de la fluctuation de vitesse de sous-maille. Selon Rocchi, il suffit de multiplier par F^2 le coefficient de diffusion dans les équations d'espèces et de température pour que le dégagement de chaleur résolue soit multiplié par un facteur F, et obtenir ainsi le bon taux de dégagement de chaleur. Une fonction d'efficacité similaire à celle définie pour les flammes prémélangées [49] est ensuite utilisée pour modéliser le plissement de sous-maille du front de flamme. De même, le coefficient de diffusion est multiplié par E^2 pour obtenir un dégagement de chaleur résolue multiplié par E. La fonction d'efficacité développée par Charlette et Meneveau [36] sera utilisée dans la suite (Eqs. 3.49 et 3.50).

Le taux d'épaississement F qui devrait être appliqué dans notre cas, est évalué de la manière suivante. Dans la zone de la flamme, la taille de maille est de l'ordre de 2.10^{-4} m et la viscosité cinématique ν est estimée à 10^{-4} m^2/s. La valeur $u'_{\Delta x}$ est estimée par application de l'opérateur OP2 de Colin *et al.* [49] sur un champ instantané de la simulation sans combustion, et prend des valeurs compris entre 1 et 5 m/s. La vitesse de flamme à richesse 1 est $S_l^0 \approx 0,45$ m/s. Avec ces valeurs, la plage de variation de F est [1,4 ; 3,2] et celle de E est [1,4 ; 2,6]. D'après ces estimations, la simulation LES sans modèle sous-prédit dans le pire des cas le taux de consommation d'un facteur $3,2 \times 2,6 = 8,2$, et dans le meilleur des cas, d'un facteur $1,4 \times 1,4 = 1,96$. Ainsi, dans le pire de cas, l'approche sans modèle devrait donc sous-prédire assez largement le taux de réaction, et la stabilisation de la flamme devrait être différente de l'expérience. Dans le meilleur des cas, l'approche sans modèle est raisonnable. Au vu de l'ensemble de ces éléments, l'approche sans modèle de combustion turbulente est conservée dans le cas présent.

Chapitre 11

LES diphasique réactive du bruleur de Cambridge avec approche standard

Sommaire

11.1 Cas non réactif 207
11.2 Cas réactif. 210
11.3 Analyse de la structure de flamme avec le modèle d'évaporation seul 217
11.3.1 Flammes purement gazeuses : branches I et II 218
11.3.2 Combustion du spray : branches III et IV 222

Dans ce chapitre, on effectue une validation expérimentale de la simulation LES du bruleur de Cambridge avec le modèle d'évaporation seul, (Abramzon-Sirignano [2]), ainsi qu'une étude détaillée de l'écoulement et de la structure de flamme.

11.1 Cas non réactif

L'aptitude de la LES à reproduire les caractéristiques principales de l'expérience est tout d'abord vérifiée pour le cas non-réactif purement gazeux, dont les mesures expérimentales de vitesse sont disponibles. L'accord entre le calcul et l'expérience pour les vitesses moyennes et RMS à différentes hauteurs (Fig. 11.3) dans la chambre de combustion, est particulièrement bon (Figs. 11.1 et 11.2). Notamment, les niveaux de fluctuation de vitesses sont bien reproduits, grâce à la simulation de la veine et des ailettes, permettant à la turbulence de se développer convenablement.

L'écoulement présente une large et longue zone de recirculation centrale (Inner Recirculation Zone IRZ) et des zones de recirculation périphériques, situées dans les coins (Corner Recirculation Zones CRZ) (Fig. 11.3). Le jet d'air giratoire impacte les parois puis est canalisé par les parois

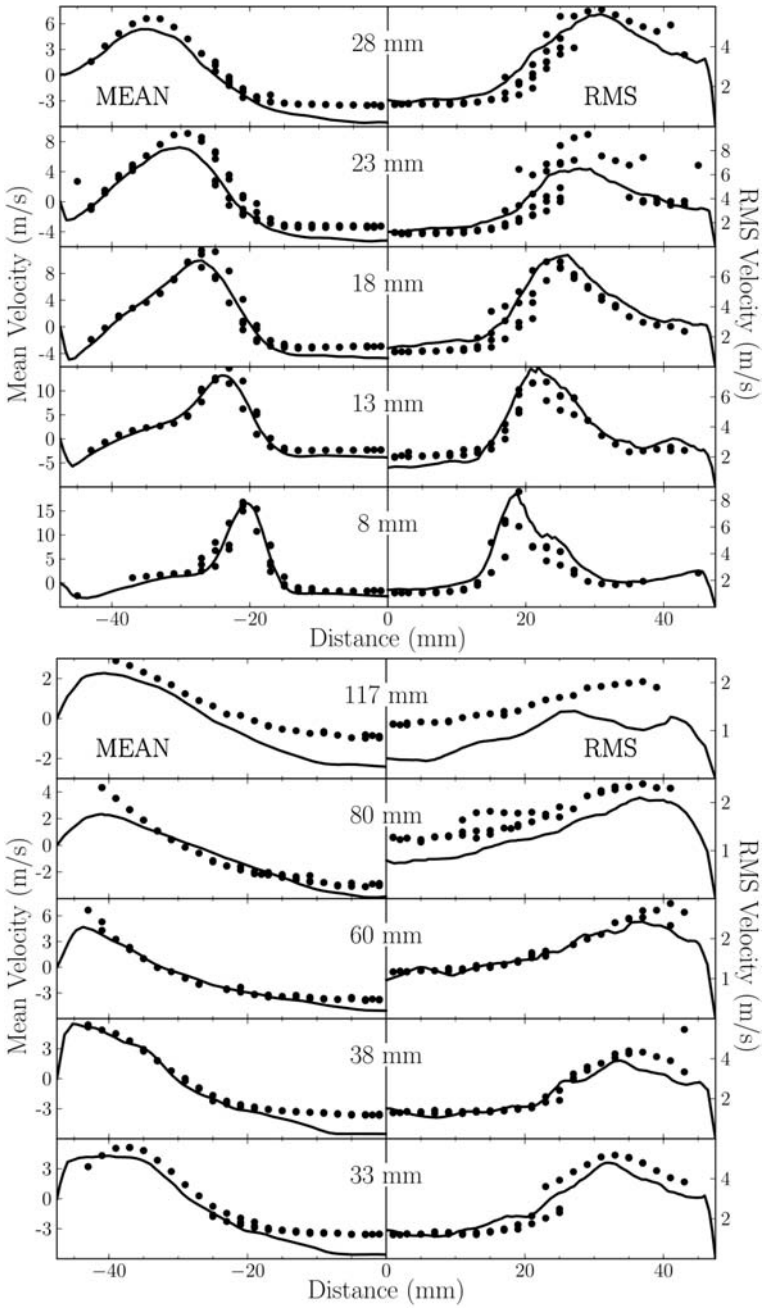

Figure 11.1 : *Cas non réactif purement gazeux : LES (lignes) versus experience (symboles) [204]. Profils axiaux de vitesse gazeuse moyenne et fluctuante à différentes hauteurs dans la chambre (Fig. 11.3).*

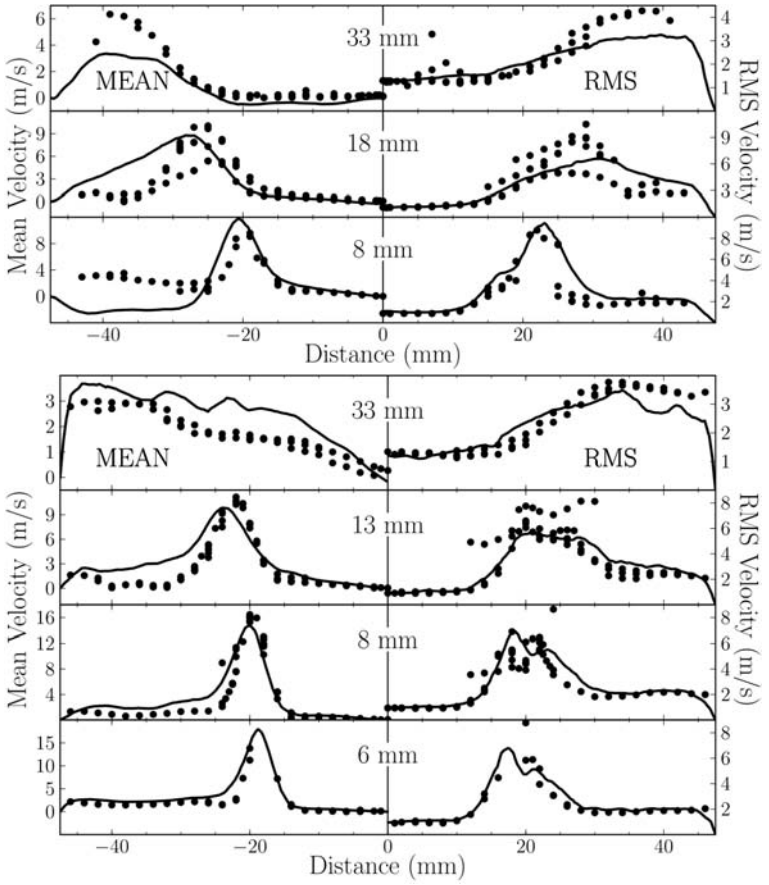

Figure 11.2 : *Cas non réactif purement gazeux : LES (lignes) versus experience (symboles) [204]. Profils radiaux et tangentiels de vitesses gazeuses moyennes et fluctuantes à différentes hauteurs dans la chambre (Fig. 11.3).*

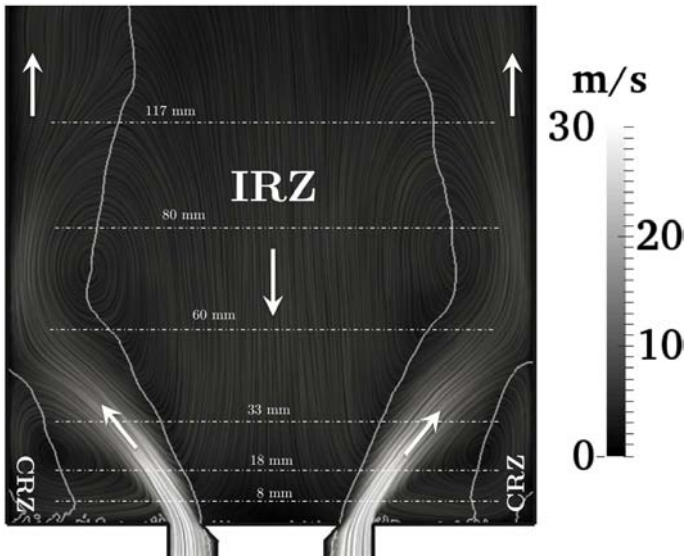

Figure 11.3 : *Cas non réactif purement gazeux : Vitesse moyenne dans le plan central de la chambre*

jusqu'à la sortie. L'IRZ s'étend jusqu'à l'extérieur de la chambre, ce qui justifie a posteriori l'ajout d'une demi-sphère atmosphérique à la sortie de la chambre.

11.2 Cas réactif

Dans le cas réactif SWH1 [204], une flamme quasi-axisymétrique en forme de M se stabilise à l'arrière du corps de veine en enveloppant le spray liquide. Une comparaison qualitative avec une image issue de l'expérience, montre un bon accord global en termes d'angle du spray, de dispersion des gouttes et de position moyenne de la flamme (Fig. 11.4). Des gouttes traversant la zone principale de réaction sont observées dans l'expérience et dans la LES. Cette interaction forte entre spray et flamme est particulièrement intéressante puisqu'elle entraine différents régimes de combustion impliquant les gouttes. En revanche, quelques différences sont à noter. Au niveau de l'axe central, la flamme expérimentale est plus proche de la paroi que dans la simulation. A cet endroit, une densité de gouttes plus importante est présente dans l'expérience, potentiellement liée à la méthode d'injection ou à la prédiction numérique des trajectoires de gouttes dans la zone dense du spray. Dans la simulation, aucune goutte n'est injectée dans cette direction, ce qui ne permet pas à la flamme de se propager plus en amont le long de l'axe de la chambre. De plus, la zone de réaction la plus intense se situe plus en aval de l'écoulement dans l'expérience, en périphérie du spray. Dans la simulation, la zone la plus intense est très proche du corps de veine, où des pertes thermiques sont appliquées. La différence de comportement observée est vraisemblablement dûe à l'incertitude sur les paramètres définissant ces pertes thermiques (température du solide et

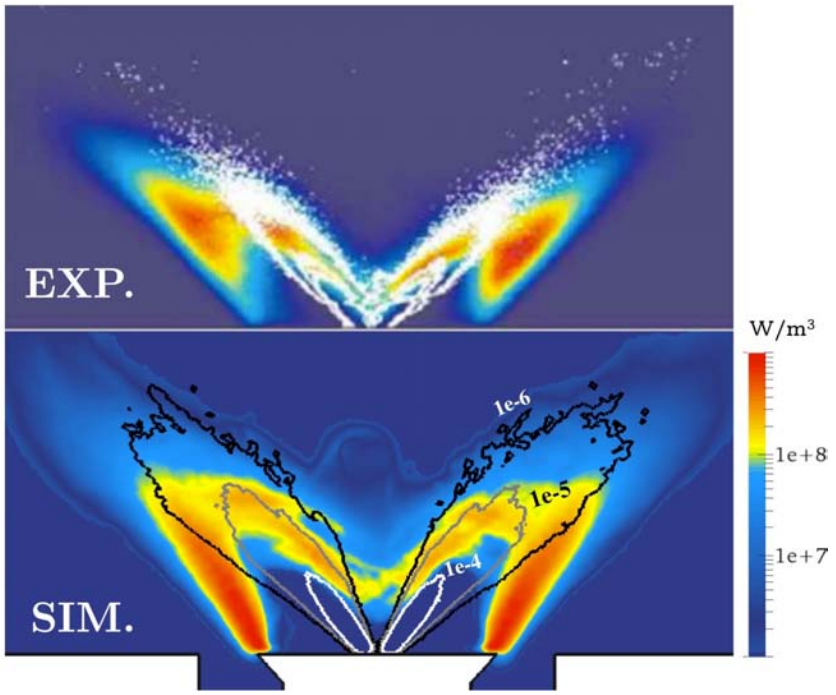

Figure 11.4 : *Cas réactif avec spray : expérience (haut) vs. LES-DPS (bas). Haut : image OH-PLIF moyennée (couleurs) et diffusion de Mie des gouttes (blanc) [32]. Les lignes horizontales correspondent aux positions de mesures de vitesses. Bas : Dégagement de chaleur moyen et iso-ligne de fraction volumique de liquide.*

résistance thermique). L'absence de mesure pour mieux caractériser ces paramètres n'a pas permis de réduire cette incertitude.

Pour analyser plus en détail cette flamme, la structure moyenne de l'écoulement est illustrée Fig. 11.2. L'injection d'air giratoire génère des zones de recirculation centrales et périphériques très similaires à l'écoulement non réactif. Proche du corps de veine, dans la zone du spray, l'échange de quantité de mouvement lié à la trainée des gouttes génère d'intenses tourbillons en périphérie du spray, qui sont contenus dans la structure en M de la flamme. Ces structures tourbillonnaires sont responsables d'un comportement instationnaire fort, schématisé en Fig. 11.6. Les tourbillons générés par l'injection liquide grossissent par augmentation progressive de leur moment cinétique dûe à la trainée du spray dense, jusqu'à ce que leur taille soit de l'ordre de la moitié de la largeur de la flamme en M. Ils sont ensuite lâchés de manière intermittente en-dehors de la flamme en M, entrainant avec eux, un mélange de gaz brulés chaud, de carburant évaporé et de gouttes. La fréquence de ce phénomène n'a pas pu être convenablement établie, au vu du temps physique simulé disponible (100 ms), mais son temps caractéristique est de l'ordre de 30 ms. Ce comportement basse fréquence rend la convergence statistique particulièrement longue à obtenir, et explique en partie le manque de symétrie observé sur les différents champs moyens.

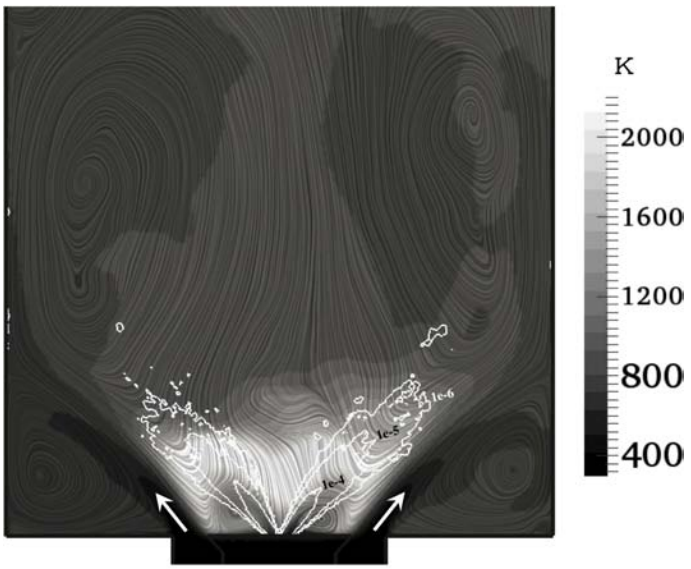

Figure 11.5 : *Cas réactif avec spray : Température moyenne et lignes de courant obtenues par LES.*

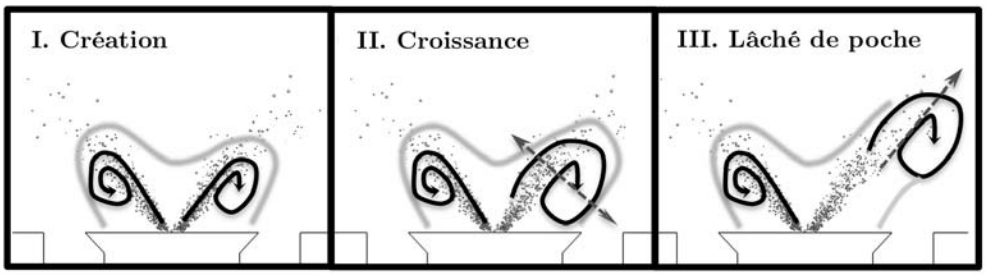

Figure 11.6 : *Schéma du comportement instationnaire des tourbillons générés à l'injection par le couplage dynamique entre spray et phase gazeuse.*

La température est maximale à la position moyenne de la flamme, et diffuse de part et d'autre de la flamme en M. A l'intérieur du M, l'évaporation du spray est fortement accélérée par la très haute température, entraînant une forte concentration en vapeur de carburant (Fig. 11.7). Les pertes thermiques à la paroi et le pompage d'énergie nécessaire à l'évaporation des gouttes entrainent une diminution locale de la température, avec un minimum situé proche du corps de veine. La flamme en M, attachée le plus souvent au corps de veine, sépare l'air frais à l'extérieur, du carburant gazeux à l'intérieur, tous deux mélangés à des produits chauds de combustion. Il s'agit donc principalement d'une flamme purement non-prémélangée, coïncidant naturellement avec la ligne stoichiométrique (Fig. 11.7).

Une comparaison quantitative des vitesses gazeuses axiales et tangentielles est donnée en Fig. 11.8 à différentes hauteurs dans la chambre. L'écoulement gazeux réactif est reproduit convenablement, notamment en ce qui concerne l'angle d'ouverture du jet, la position et l'intensité des pics

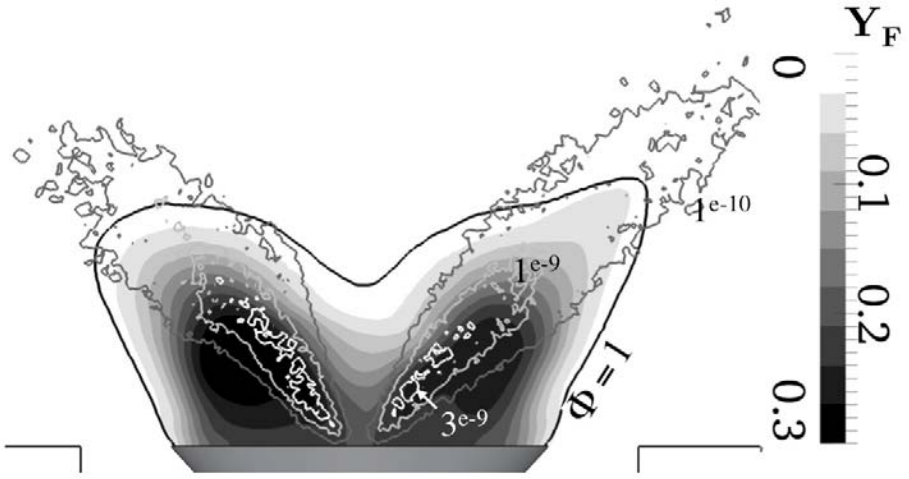

Figure 11.7 : *Cas réactif avec spray : Fraction massique de carburant, ligne stoechiometrique (noire $Y_{st} = 0.062$) et iso-lignes de transfert de masse obtenues par LES.*

de vitesse. Une mesure expérimentale à l'intérieur du spray n'est malheureusement pas disponible, puisque la précision des mesures LDA n'est pas assurée en présence de gouttes liquides. Les fluctuations de vitesse dans la simulation sont sur-prédites en zone proche du corps de veine, ce qui est probablement lié à la différence de position moyenne de la flamme, déjà mentionnée.

Enfin, les profils moyens de vitesses des gouttes sont comparés en Fig. 11.9 à trois hauteurs différentes. Les mesures de vitesse de gouttes, détaillées en [31], fournissent une moyenne arithmétique sans considération de la taille ou de la masse des gouttes. L'accord entre expérience et simulation est bon au niveau du coeur central du spray, relativement dense en gouttes (zone grisées en Fig. 11.9). En dehors de cette région, des différences significatives sont observées, qui peuvent être liées aux deux raisons suivantes. Premièrement, par rapport à la position moyenne du spray fournie par diffusion de Mie des gouttes (Fig. 11.4), la topologie du spray simulé est légèrement différente : des gouttes sont présentes en des endroits où très peu de gouttes sont observées dans l'expérience, et inversement. Deuxièmement, le comportement inertiel des gouttes, très différent en fonction de la taille, est analysé par classe de diamètre (Fig. 11.9) : les grosses gouttes conservent leur inertie initiale plus longtemps que les petites gouttes, plus susceptitbles de suivre l'écoulement. Les trois classes choisies en Fig. 11.9 contribuent de manière très différente à la moyenne arithmétique de la vitesse. De ce fait, une petite erreur sur la distribution de taille su spray injecté impacte directement la moyenne arithmétique, notamment dans les zones faiblement chargées en gouttes. Une telle sensibilité de la vitesse moyenne à la distribution en taille des gouttes, ne permet pas de tirer de conclusions convenables en-dehors du coeur du spray. Des diagnostics plus détaillés, fournissant notamment la distribution locale en taille de gouttes, seraient nécessaires pour interpréter les résultats de simulation.

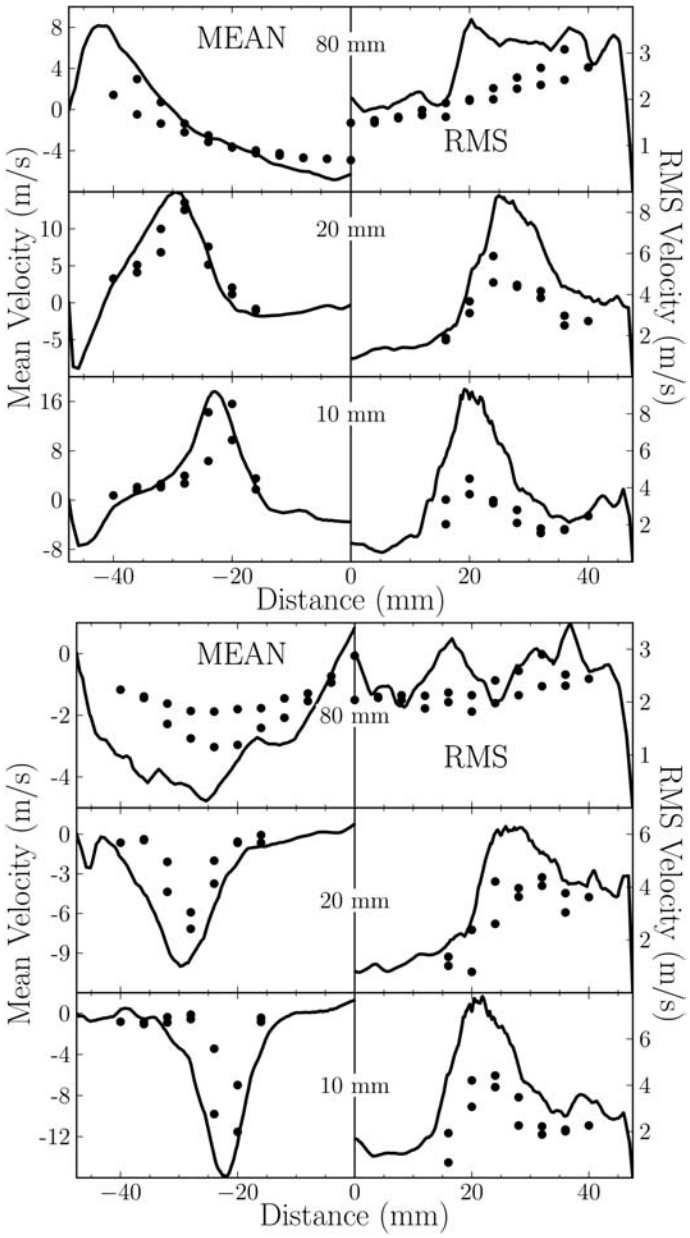

Figure 11.8 : *Cas réactif avec spray : LES-DPS (lignes) vs. expérience (symboles) [204]. Profils de vitesse gazeuse moyenne (gauche) et fluctuante (droite) axiale (haut) et tangentielle (bas) pour trois hauteurs différentes dans la chambre (cf. Fig. 11.4).*

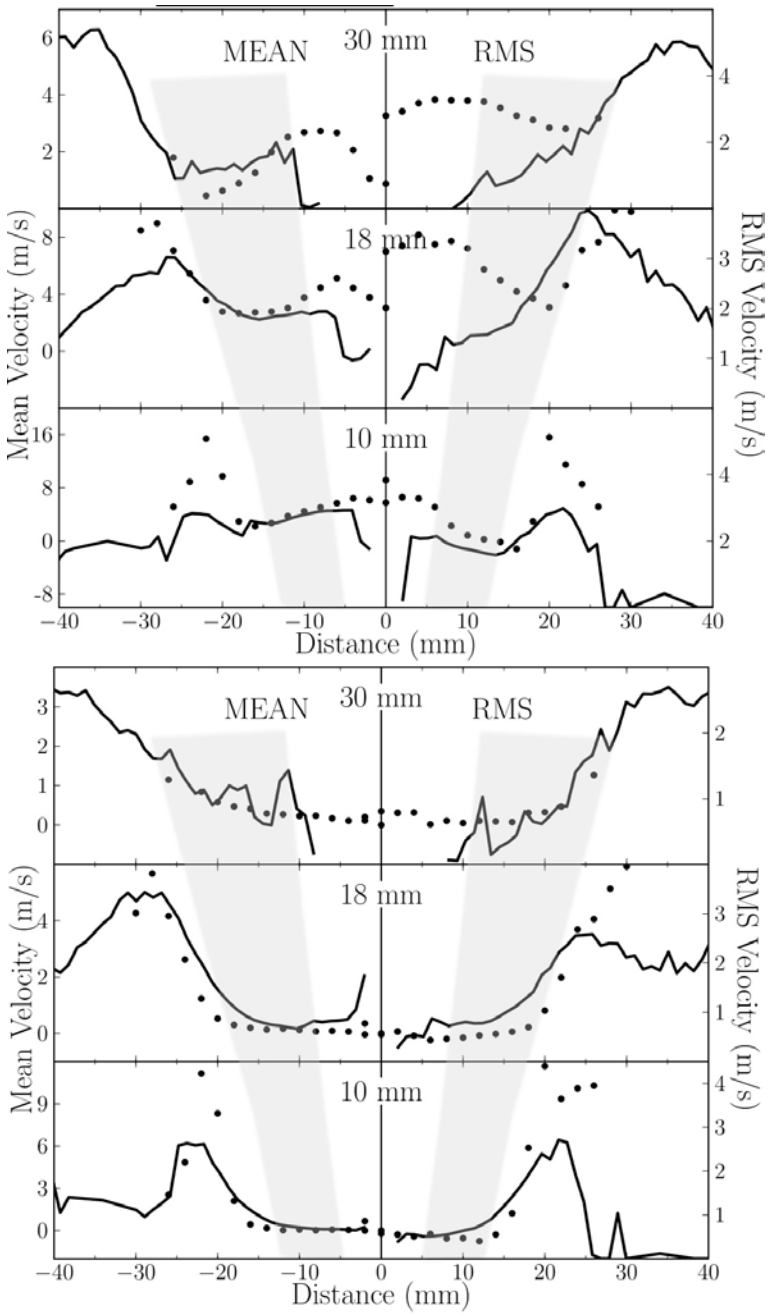

Figure 11.9 : *Cas réactif avec spray : LES-DPS (lignes) vs. expérience (symboles) [204]. Profils de vitesse* ***liquide*** *moyenne (gauche) et fluctuante (droite) axiale (haut) et tangentielle (bas) pour trois hauteurs différentes dans la chambre (cf. Fig. 11.4. Le coeur du spray est matérialisé par la zone grisée.*

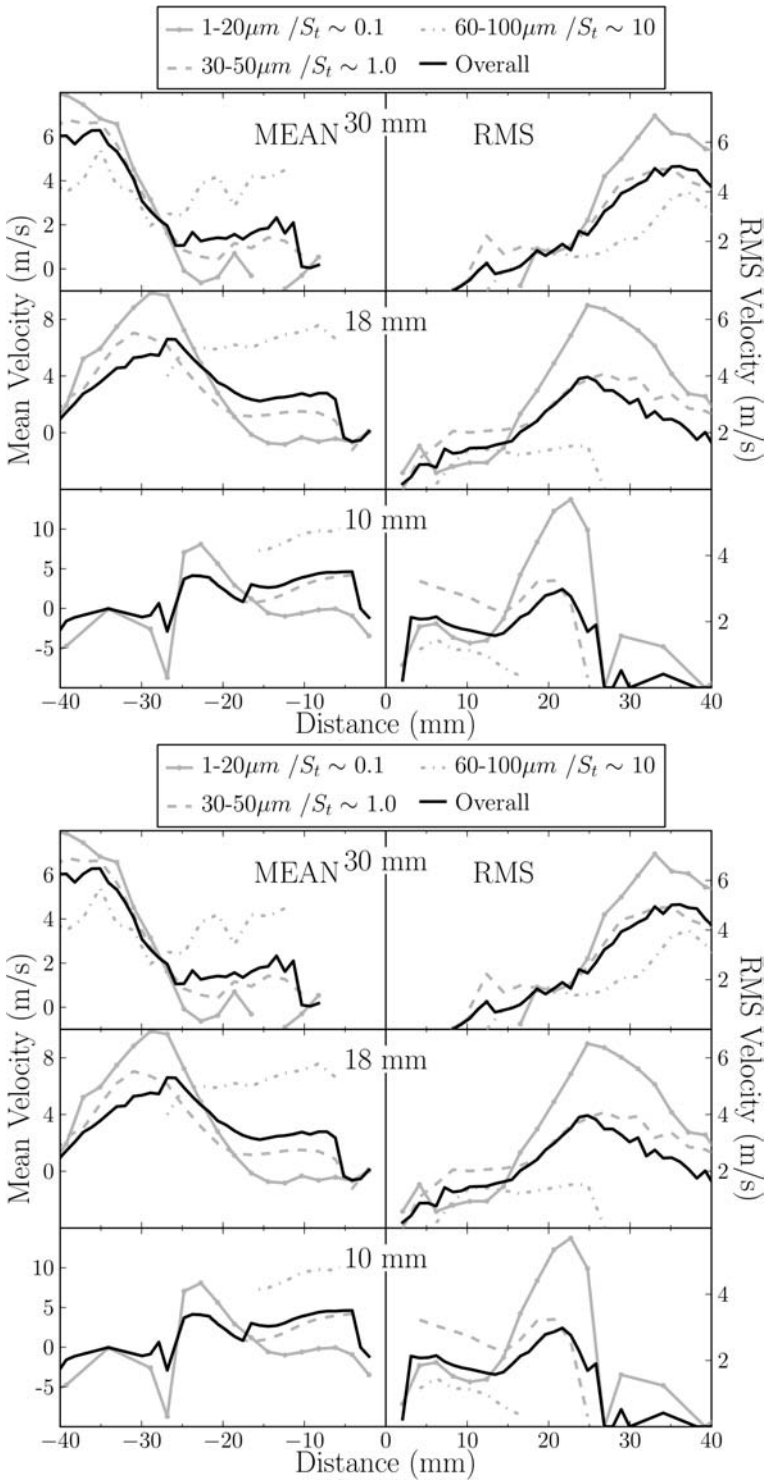

Figure 11.10 : *Cas réactif avec spray : profils de vitesse* ***liquide*** *moyenne (gauche) et fluctuante (droite) axiale (haut) et tangentielle (bas) pour trois hauteurs différentes dans la chambre (cf. Fig. 11.4), pour trois classes de diamètre de goutte, comparés à la moyenne totale.*

11.3 Analyse de la structure de flamme avec le modèle d'évaporation seul

Les champ instantanés de dégagement de chaleur obtenus par LES et expérience (Fig. 11.11) montrent un front de flamme similaire, de forme caractéristique en M, ayant une épaisseur très fine. Quatre régions relativement distinctes du front de flamme peuvent être identifiées. La branche extérieure du M, de forme conique, numérotée I, est une flamme fortement plissée qui se stabilise à une distance fluctuante et non nulle du corps de veine. La partie centrale de la flamme, en forme de V et numérotée II, consiste en un front de flamme très faiblement plissé, se stabilisant au voisinage du point le plus amont de l'IRZ, le long de la ligne stœchiométrique (Fig. 11.7). Ces deux branches (I et II) sont des flammes purement gazeuses, alimentées par la pré-évaporation des gouttes à l'intérieur de la flamme en M. Les deux dernières zones, numérotées III et IV, correspondent à des flammes complexes, où le spray est en interaction directe avec la zone de réaction, et où différents régimes de combustion diphasique peuvent être observés. En III, un front de flamme relativement similaire aux branches I et II brûle du carburant pré-évaporé mais contient également des gouttes évaporantes dont certaines parviennent à le traverser. Dans la région IV, les gouttes ayant survécu à la région III, entrent dans une zone de gaz frais, entraînant l'apparition d'une réaction très locale autour d'elles. Dans la suite, ces quatre régions sont analysées en détail.

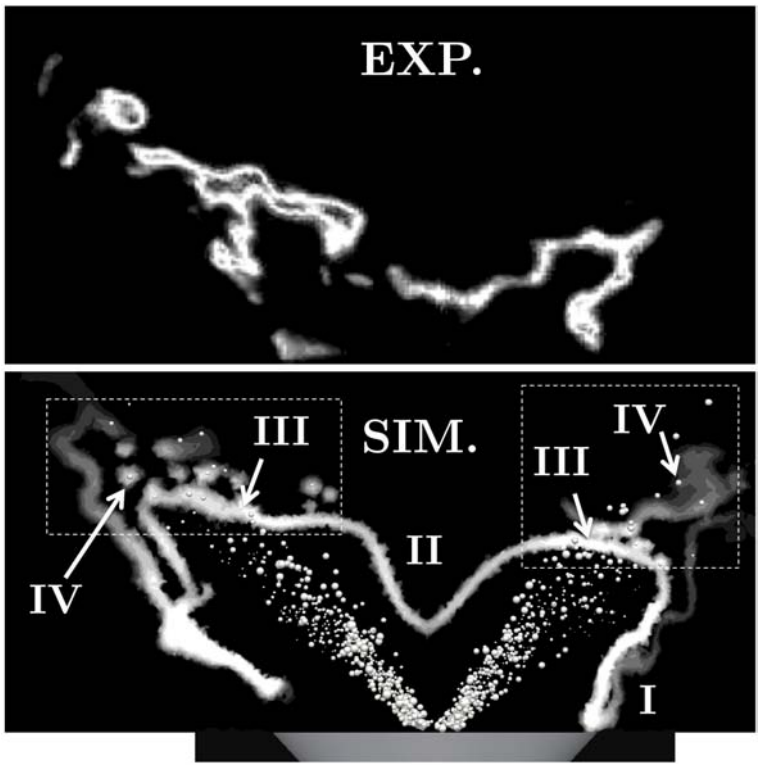

Figure 11.11 : *Cas réactif avec spray. Haut : image instantanée de OH-PLIF, tirée de l'expérience [32]. Bas : champs instantanés de dégagement de chaleur (grey levels) et des gouttes (white) obtenus par LES.*

11.3.1 Flammes purement gazeuses : branches I et II

Un indice de Takeno [201] est tout d'abord utilisé pour analyser la structure de flamme. Il est défini par :

$$I_{flame} = \frac{\nabla Y_F \nabla Y_{Ox.}}{\|\nabla Y_F \nabla Y_{Ox.}\|} H_R \tag{11.1}$$

Un indice I_{flame} positif dans la flamme indique une combustion prémélangée tandis qu'un indice négatif indique un combustion non-prémélangée. Il est important de noter que la validité d'un tel indice n'est assurée que dans les zones purement gazeuses, la présence de gouttes évaporantes pouvant modifier les gradients d'espèces. Un champ d'indice de Takeno, présenté en Fig. 11.12, montre clairement une structure de flamme non- prémélangée. Un zone de flamme prémélangée, moins puissante, est aussi visible coté air de la flamme non-prémélangée. Ce front est dû à la vapeur de fuel présente à l'extérieur de la flamme, issue des gouttes l'ayant traversé, mais qui reste en faible concentration.

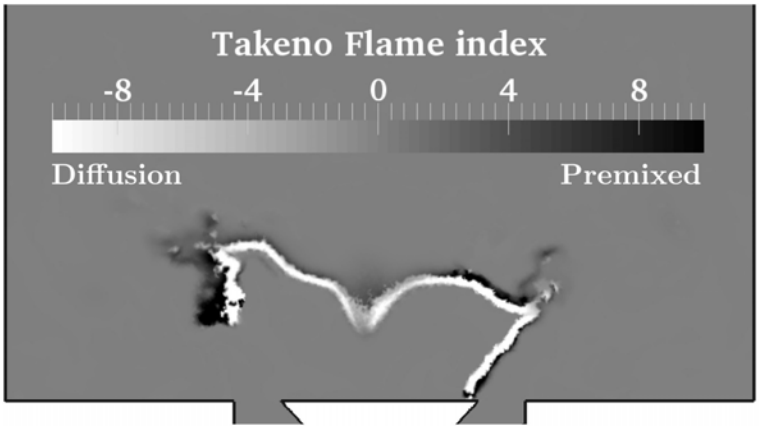

Figure 11.12 : *Indice de Takeno (Eq. 11.1) évalué sur un champ instantané.*

En accord avec la théorie des flammes de diffusion laminaires [162] et par analogie avec l'écoulement à contre courant, le taux de dissipation scalaire évalué à la stoechiométrie pour une flamme non-prémélangée stabilisée dans un écoulement permet d'évaluer l'étirement local a [162] (Eq. 10.9).

Dans le contexte LES, la dissipation scalaire sur la ligne stoechiométrique χ_{st}^{LES} peut être considérée comme une bonne estimation du taux d'étirement résolu effectivement subi par l'élément de flamme :

$$\widehat{a}^{LES} = \pi \widehat{\chi}_{st}^{LES} \exp[2(\mathrm{erf}^{-1}(1 - 2Z_{st}))^2] \tag{11.2}$$

La PDF de $\widehat{a}^{LES}$, évaluée sur l'iso-surface stœchiométrique d'un champ instantané, est montrée en Fig. 11.13. Des taux d'étirement allant jusqu'à $O(100s^{-1})$ sont vus par la flamme de diffusion, avec un taux d'étirement moyen de $O(10s^{-1})$. Cette plage d'étirement correspond à des taux

d'étirement modérés comparés à la limite d'extinction, mesurée à environ 600 s^{-1} dans des conditions similaires par Seiser *et al.* [180]. Dans cette plage d'étirement, la chimie réduite se comporte de manière relativement convenable par rapport à la chimie détaillée (Fig. 10.6), avec une légère sur-prédiction du taux de dégagement de chaleur en chimie réduite.

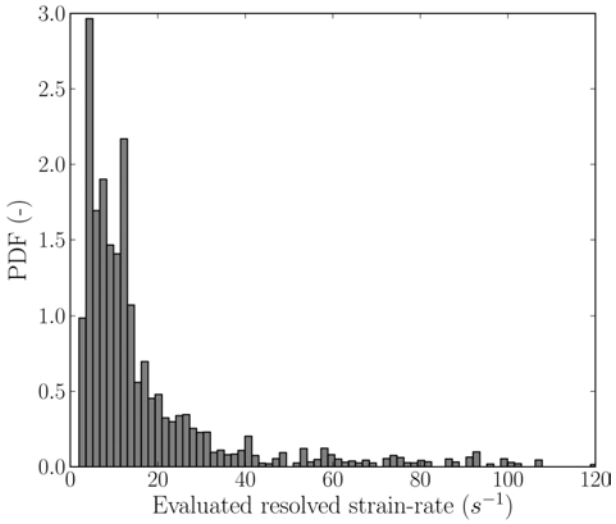

Figure 11.13 : *PDF de l'étirement résolu vu par la flamme, évalué à partir du taux de dissipation scalaire à la stoechiométrie dans la LES (Eq. 11.2).*

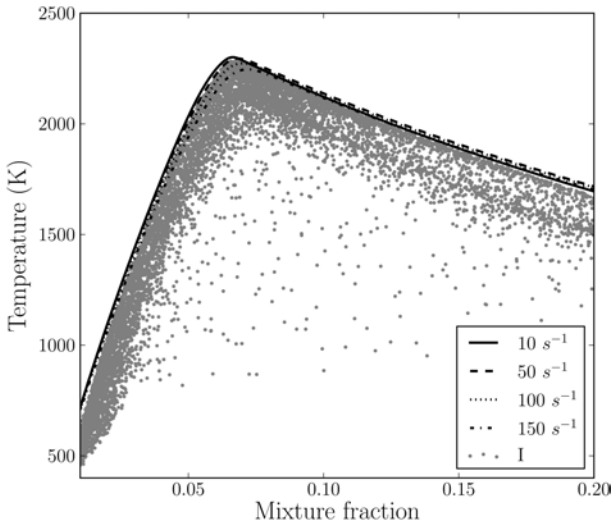

Figure 11.14 : *Température et fraction de mélange, obtenues pour la branche I (Fig. 11.11) dans la LES.*

Les structures de flammes instantanées des branches I et II sont ensuite analysées dans l'espace de fraction de mélange Z (Figs. 11.14 et 11.15) et comparées à des flammes de diffusion étirées à différents niveaux d'étirement, calculées avec la même chimie réduite. En Fig. 11.15, les points T-Z de la branche II sont concentrés le long du profil de flamme laminaire faiblement étirée, ce qui est

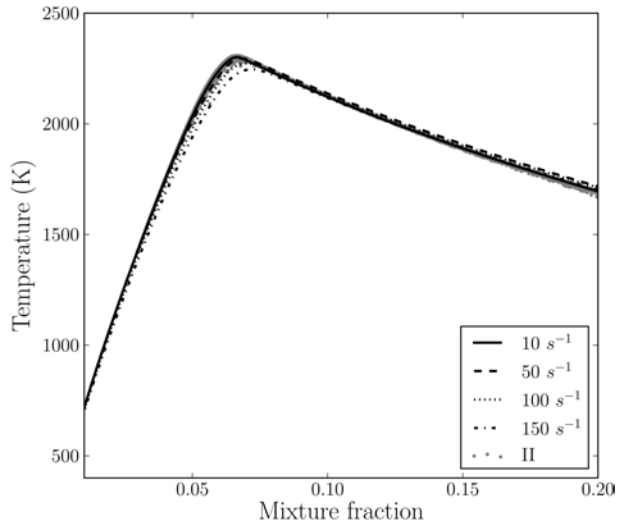

Figure 11.15 : *Température et fraction de mélange, obtenues pour la branche II (Fig. 11.11) dans la LES.*

cohérent avec le fait que la branche II subit un étirement et une intensité de turbulence très faibles. La stabilisation de cette flamme est assurée par l'IRZ, qui maintient le front de flamme proche de la zone d'injection riche (Fig. 11.2). La flamme suit naturellement la ligne stoechiométrique entre l'oxygène recirculant par le haut et la vapeur de carburant préchauffée par le bas.

En comparaison, la dispersion des points T-Z de la branche I est beaucoup plus forte (Fig 11.14). Cette dispersion est la conséquence de l'étirement intense et fluctuant subi localement par le front de flamme, dans cette zone turbulente de fort cisaillement. De plus, la branche I contient aussi un certain nombre de points T-Z de type prémélangé (n'ayant pas encore atteint leur état d'équilibre). La présence de ces points est liée au mécanisme de stabilisation et de détachement intermittent de la flamme proche de la paroi. Ce mécanisme met en jeux plusieurs phénomènes, schématisés en Fig. 11.16.

Premièrement, les pertes thermiques à la paroi du corps de veine ne permettent pas à la flamme de venir très prés de la paroi. Les pertes thermiques totales sur le mur d'environ 100 W, bien qu'inférieures à la puissance de la flamme de 5.4 kW, suffise à annihiler toute réaction proche de la paroi, du fait de la faible température (800 K). Le profil radial de flux thermique le long de la paroi, obtenu après moyenne azimutale, montre deux pics d'intensité de flux équivalentes, logiquement corrélées à la température du gaz à la paroi (Fig. 11.17). Le pic central est lié à la recirculation de produits de réaction chauds le long de l'axe, visible en Fig. 11.2, qui maintiennent une température d'environ 900 K en proche paroi. Le pic extérieur, proche du bord du corps de veine, est lié à la présence du pied de la flamme, qui maintient une haute température.

Lorsque ces pertes thermiques sont combinées à l'arrivée intermittente de tourbillons issus de la veine d'injection giratoire, l'écoulement est parfois suffisamment puissant pour entrainer le détachement du pied de flamme du corps de veine. Ce mécanisme entraine une fuite de vapeur

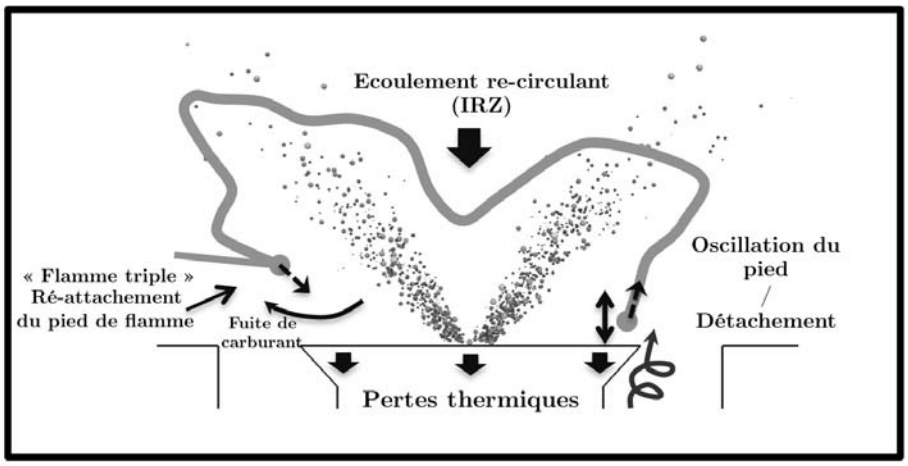

Figure 11.16 : *Schéma du mécanisme de stabilisation de flamme des branches I et II (Fig. 11.11).*

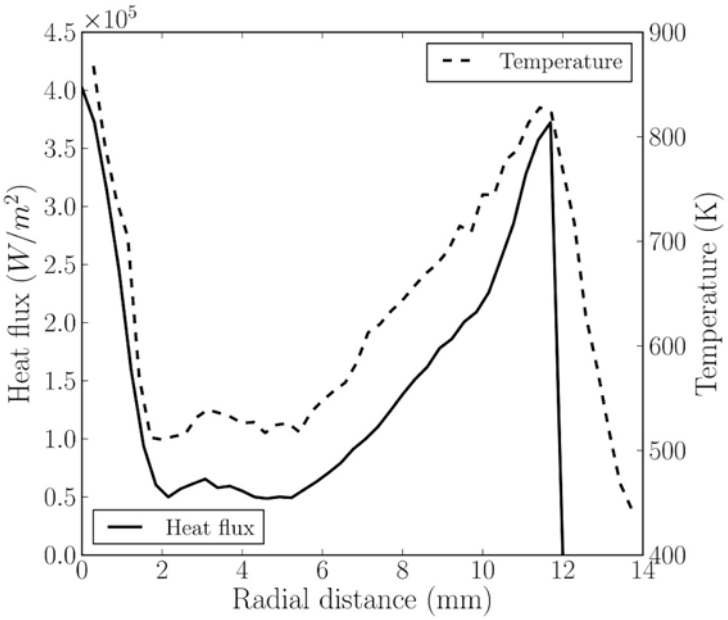

Figure 11.17 : *Profils radiaux moyens de flux thermiques et de température à la paroi du corps de veine (Fig. 11.11).*

de carburant de l'intérieur de la flamme en M, vers l'extérieur, permettant un mélange avec l'air environnant. Ce mélange crée une petite flamme de prémélange, à l'extérieur de la flamme en M, qui s'allume au pied de flamme, visible en Fig. 11.11. Le pied de flamme est alors très similaire à une flamme triple (illustré précédemment en Fig. 2.9), capable de se propager. Au bout d'un certain temps, le pied de flamme réussit à se ré-attacher à la paroi. Comme la flamme en M est

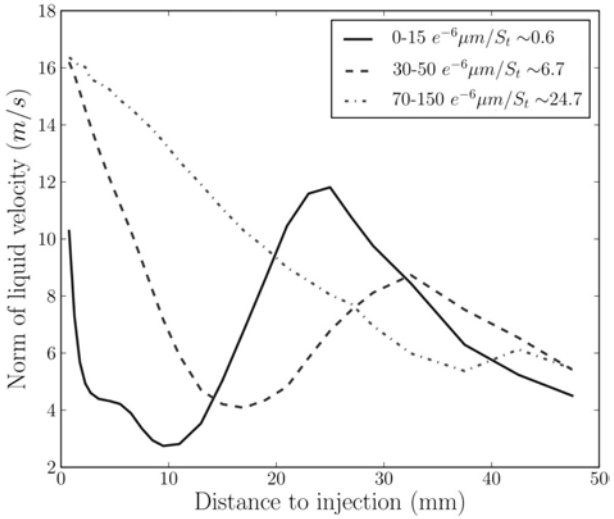

Figure 11.18 : *Evolution de la vitesse moyenne des gouttes le long l'axe central de la chambre. Moyennes obtenues dans des plans successifs, perpendiculaires à l'axe, pour trois classes de diamètre de goutte.*

axi-symétrique, une partie du pied de flamme peut être attachée quand une autre est détachée, ce qui maintient un attachement global de la branche I sur la paroi du corps de veine.

11.3.2 Combustion du spray : branches III et IV

11.3.2.1 Impact de la polydispersion du spray

En fonction de sa taille, la goutte présente un comportement spécifique en terme d'évaporation et de trajectoire. Trois classes de diamètres de gouttes sont définies afin d'isoler les comportements particuliers liés à la taille des gouttes. Par simplicité de langage, les gouttes appartenant aux classes correspondant à $d_p < 15\mu m$, $d_p \sim SMD \sim 40\mu m$, et $d_p > 70\mu m$ seront respectivement appelées "petites", "moyennes" et "grosses" gouttes.

La polydispersion a tout d'abord un impact important sur la structure globale de la dispersion du spray. Pour analyser le comportement dynamique, l'évolution axiale de la vitesse des gouttes et de l'angle de leur trajectoire avec l'axe de la chambre, obtenue par moyenne dans des plans perpendiculaire successifs, est montrée en Figs. 11.18 et 11.19 respectivement, pour les trois classes de gouttes. Pour chaque classe, le nombre de Stokes $\mathcal{S}_t$ (Eq. 4.21) défini pour une taille de goutte moyenne de la classe, est utilisé. Le temps fluide associé τ_f est évalué à partir des caractéristiques moyennes de la turbulence de l'écoulement, en utilisant une évaluation de l'échelle de Kolmogorov η_k et du taux de dissipation ϵ dans cette zone :

$$\tau_f \sim \sqrt[3]{\eta_k^2/\epsilon} \tag{11.3}$$

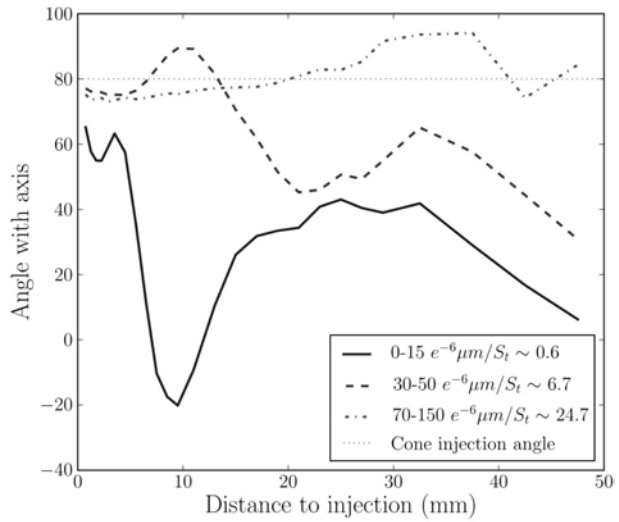

Figure 11.19 : *Evolution de l'angle axial moyen de la trajectoire, le long l'axe central de la chambre. Moyennes obtenues dans des plans successifs, perpendiculaires à l'axe, pour trois classes de diamètre de goutte.*

La Figure 11.18 montre que toutes les gouttes ralentissent puisqu'elles sont injectées avec une vitesse plus grande que la vitesse de l'écoulement à l'injection. Après cette phase initiale courte, les grosses gouttes sont pratiquement insensibles à la variation de vitesse gazeuse, et suivent une trajectoire quasi-rectiligne depuis leur point d'injection (Fig. 11.19). Au contraire, les petites gouttes décélèrent immédiatement et sont entrainées ensuite par l'écoulement. La forte décélération entraine un accumulation de petites gouttes en zone proche de l'injecteur. Cette ségrégation spatiale en taille contribue à stratifier la richesse locale, très élevée et homogène à l'injection, faible et hétérogène en aval.

Dans un deuxième temps, la polydispersion du spray joue sur l'intensité locale de l'évaporation. Le transfert massique moyen de carburant issu de l'évaporation (Fig.11.20) est faible à l'injection puisque les gouttes injectées sont froides. Le taux de transfert augmente rapidement du fait du préchauffage rapide des petites gouttes (Fig. 11.21), qui atteignent rapidement une température proche de la température humide (d'environ 360 K dans ces conditions particulières). En aval, l'expansion radiale du spray entraine un diminution rapide de la concentration du spray, générant une baisse du taux de transfert massique local, compensée en partie par l'augmentation de la contribution individuelle des gouttes de plus grand diamètre, progressivement chauffées. A l'extérieur de la flamme en M, le taux de transfert de masse devient très faible, car seul un résidu faible de carburant liquide atteint cette zone. De plus, le taux d'évaporation est annihilé par une forte dilution avec les gaz frais. Par conséquent, la température liquide diminue au-delà la flamme en M (dans cette simulation avec modèle d'évaporation seul). Enfin, on observe bien en Fig. 11.21 que le temps de réponse de la température liquide à la variation de température gazeuse, augmente avec la taille de la goutte. Les plus petites gouttes sont préchauffées plus rapidement dans la flamme et plus rapidement refroidies ensuite. L'essentiel de l'évaporation se fait à l'intérieur de la flamme

en M, hors de la zone de réaction. Le carburant pré-évaporé dans cette zone assure l'alimentation des flammes purement gazeuses I et II.

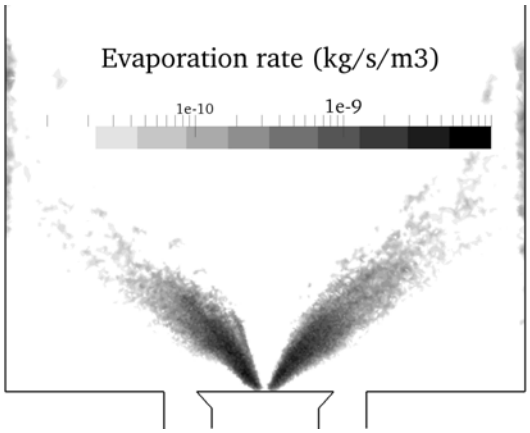

Figure 11.20 : *Taux d'évaporation moyen.*

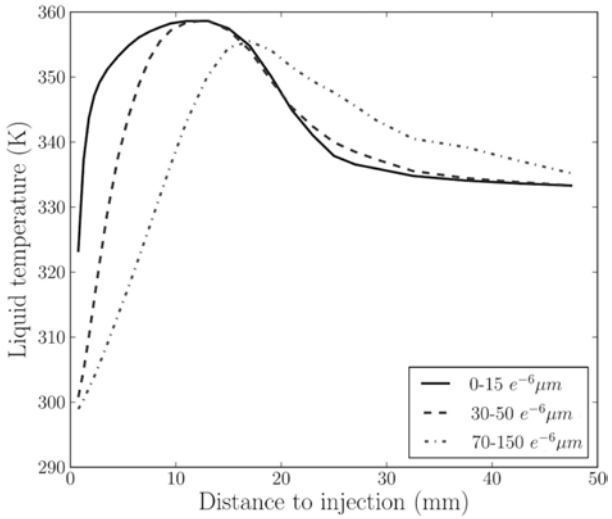

Figure 11.21 : *Evolution de la température liquide, le long l'axe central de la chambre. Moyennes obtenues dans des plans successifs, perpendiculaires à l'axe, pour trois classes de diamètres de gouttes.*

Enfin, une analyse de l'évolution de la distribution en nombre et en volume de la taille des gouttes le long de l'axe est proposé en Fig. 11.22. La population se dépeuple au début (y de 0 à 15 mm) au niveau des petits diamètres, du fait de leur évaporation rapide et de leur taille. Lorsque la flamme est atteinte par le spray (y $\sim$ 15 mm), la distribution se déplace rapidement vers les plus petits diamètres du fait de l'évaporation. La quantité de gouttes diminue très fortement en aval. Un certain nombre de gouttes subsiste assez loin en aval de la chambre.

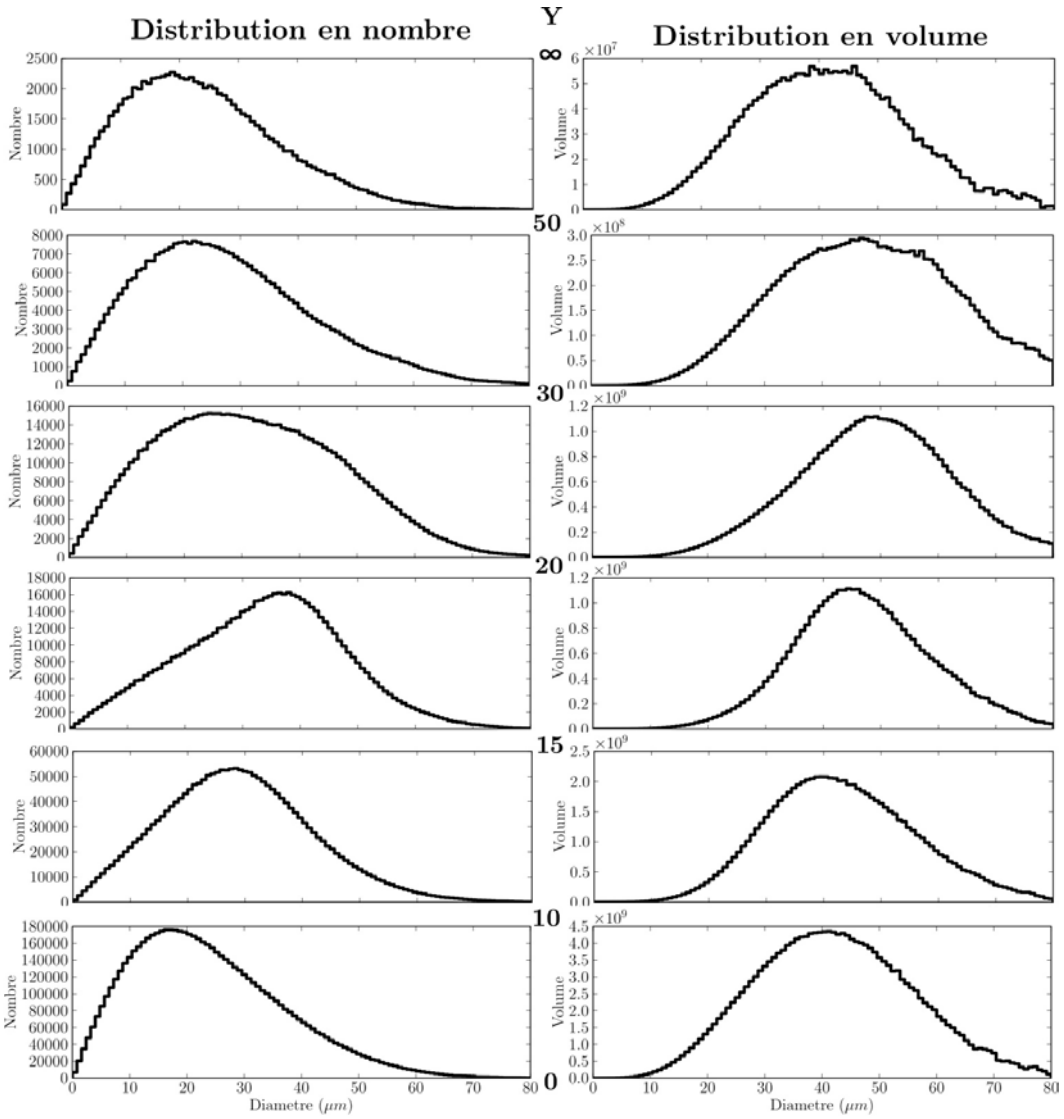

Figure 11.22 : *Evolution de distribution en nombre et en volume de la taille des gouttes, pour différentes tranches comprise entre la position axiale y_- et y_+, dans la chambre.*

11.3.2.2 Régimes de combustion diphasique

La présence simultanée de l'évaporation des gouttes et des réactions chimiques dans les zones III et IV, entraine la formation d'une structure de flamme complexe, impliquant directement la phase liquide.

La Fig. 11.24 montre que la structure de flamme de la zone III est similaire à celle observée en zone I et II, présentant un comportement non-prémélangé très proche de la structure de flamme laminaire non-premélangée étirée. De fait, cette flamme est principalement alimentée par le carbu-

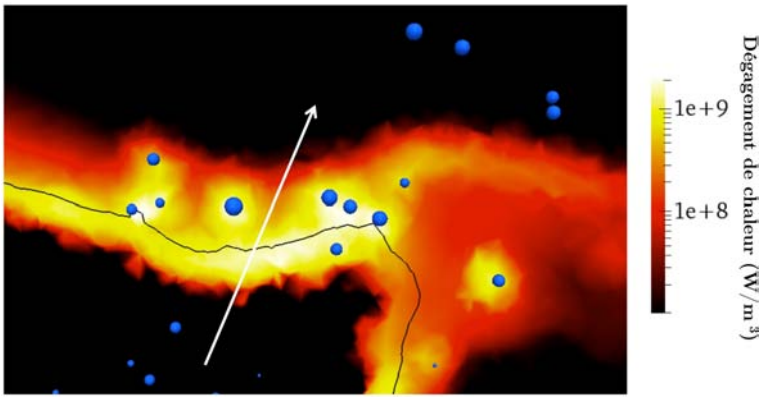

Figure 11.23 : *Agrandissement de la zone III et IV, dégagement de chaleur pour le modèle standard AS.*

rant pré-évaporé, transporté avec le spray et générant une flamme de diffusion relativement stable. Cependant, au contraire des branches I et II, des gouttes entrent dans cette zone de réaction, où la haute température gazeuse entraine une augmentation rapide de leur température (Fig. 11.21) et de leur taux évaporation. La vapeur de carburant est ainsi directement produite dans la zone de réaction et modifie le taux de réaction local, comme illustré en Fig. 11.23. Ainsi, le front de flamme présente des variations locales de son taux de dégagement de chaleur, liées aux passages intermittents des gouttes au travers du front. Dans cette zone, soit l'intégralité du carburant localement produit est instantanément brulée, et le dégagement de chaleur augmente localement, soit une partie de ce carburant seulement est brulée, ce qui entraine une accumulation de vapeur de carburant autour de la goutte. L'augmentation de la richesse autour des gouttes qui résulte de cette accumulation modifie légèrement la position de la ligne stoechiométrique et contribue à plisser davantage la flamme (Fig. 11.23) . Ce comportement a déjà été observé dans une expérience [142].

La branche III est régulièrement brisée par le lâcher intermittent, déjà évoqué, de grands tourbillons générés à l'injection (Fig. 11.6), entrainant l'émission simultanée de poches de vapeur de carburant mélangée à des produits chauds de combustion et à des gouttes. Ces poches finissent de brûler en aval, encerclées par une flamme de diffusion, de manière très similaire au régime de combustion externe de groupe [43]. Ce comportement semble être observé sur les images expérimentales instantanées de OH-PLIF (Fig. 11.11), bien que la présence de gouttes ne soit pas parfaitement établie dans l'expérience. Une mesure simultanée de la position des gouttes et de OH-PLIF permettrait de répondre à cette question avec plus de certitude.

Contrairement à la zone III, les points T-Z de la zone IV sont concentrés du coté pauvre et n'atteignent pas la température maximum de la branche III (Fig. 11.24), faisant penser à une flamme prémélangée pauvre. Le dégagement de chaleur dans cette zone est faible par rapport à la branche III. En fait, dans cette zone, une forte dilution du mélange produits chaud + gouttes avec l'air frais entraine une diminution rapide de la température gazeuse et de la richesse. Les gouttes

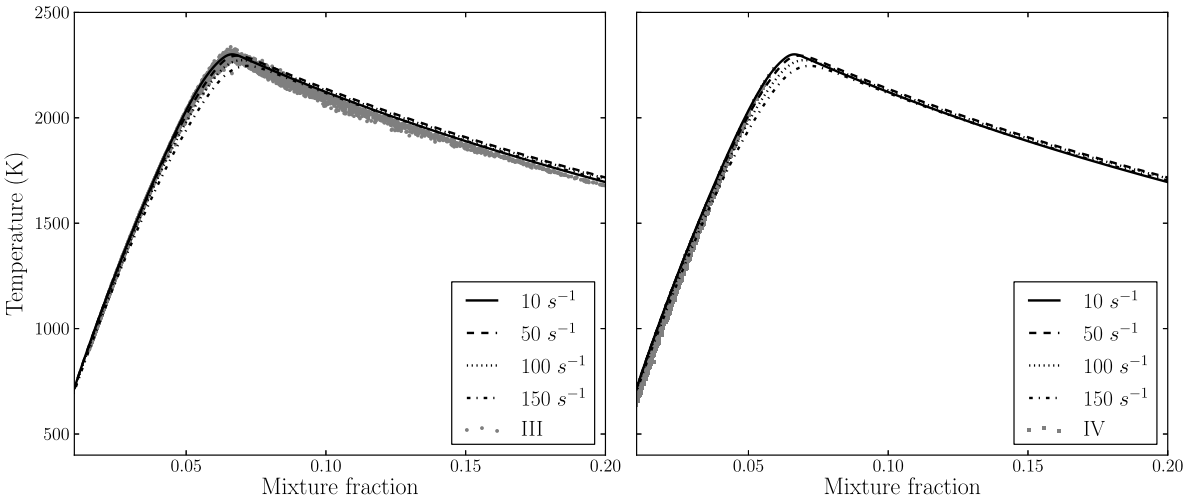

Figure 11.24 : *Température et fraction de mélange, obtenues pour les branches III (droite) et IV (gauche)(Fig. 11.11) dans la LES.*

qui ont réussi à traverser la branche III, continuent de s'évaporer. Juste en aval de la flamme en M, tant que la température reste suffisamment élevée, une combustion a lieu très localement autour d'une ou de quelques gouttes proches. Cette structure locale est aussi observable sur les images instantanées de OH-PLIF (Fig. 11.11), où les toutes petites poches de signal correspondent probablement à la combustion de gouttes. Dans la simulation, comme déjà précédemment évoqué, le maillage n'est pas suffisamment fin pour résoudre un éventuel front de flamme local pouvant s'établir autour d'une goutte individuelle. De ce fait, la combustion a lieu dans un volume autour de la goutte, comme déjà évoqué en Sect. 8.2.1 : les gouttes génèrent des pics de vapeur de carburant à leur position, qui se mélange avec l'air disponible et brûle en mode prémélangé.

Plus en aval, la température environnante vue par la goutte diminue rapidement du fait de la dilution avec les gaz frais (Fig. 11.11). Les taux de réaction diminuent jusqu'à devenir trop faibles pour maintenir une température élevée. En conséquence, la température liquide diminue rapidement (Fig. 11.21), entrainant une baisse significative du taux d'évaporation et de la richesse. Finalement, la combustion s'arrête et une partie de la vapeur de fuel évaporée reste imbrulée. La sous-résolution du maillage peut entrainer une erreur importante : même dans un milieu froid, la combustion en goutte isolée peut se maintenir grâce à une flamme de diffusion de la taille de la goutte. En revanche, l'apparition d'un régime de combustion de goutte isolée n'est pas avérée dans cette zone. Dans la suite, trois critères sont développés pour évaluer l'occurrence de ce régime particulier de combustion.

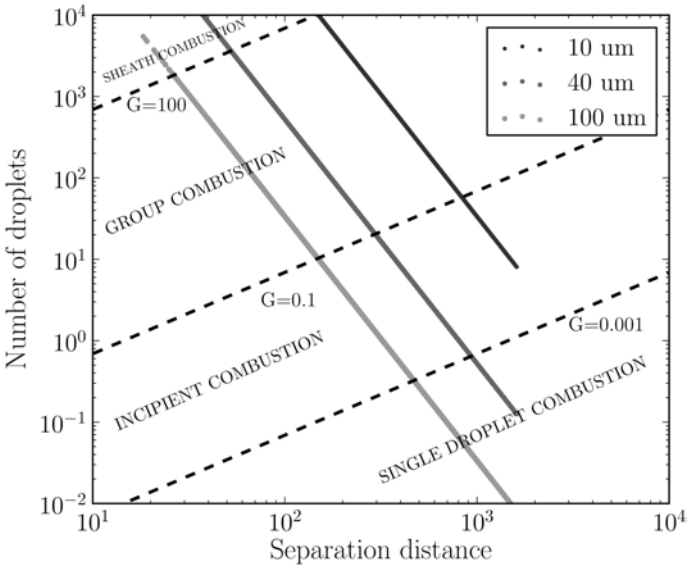

Figure 11.25 : *Diagramme de combustion de groupe : évaluation des états obtenus dans la simulation, pour trois diamètres différents.*

11.3.2.3 Critère d'apparition du régime de combustion en goutte isolée

Une approche classique pour étudier les régimes de combustion de spray de manière macroscopique est de regarder la valeur du nombre de groupe G, évoqué en Sect. 2.3.3. Le nombre de groupe peut être défini dans le cas présent de la manière suivante [5] :

$$G \sim \alpha_l \left(\frac{d_{nuage}}{d_p} \right)^2 \tag{11.4}$$

avec α_l la fraction volumique liquide locale, d_{nuage} le diamètre d'un nuage de gouttes typique et d_p un diamètre moyen dans ce nuage. Le paramètre d_{nuage} choisi ici correspond à l'épaisseur moyenne de la nappe de spray du cône creux, d'environ 1 cm. Une évaluation de G pour trois tailles de gouttes est disposée dans le diagramme de combustion de goutte (Fig. 11.25), qui classifie les régimes de combustion de gouttes en fonction de l'espacement moyen intergoutte et de la valeur du nombre G (Sect. 2.3.3). Dans le cas présent, selon cette analyse, une combustion de groupe est possible pour les trois tailles de gouttes. En revanche, la combustion de goutte isolée n'est possible que pour des gouttes dont le diamètre est supérieur à ~ 30 μm.

Cette première analyse ne prend pas en compte les conditions gazeuses locales du spray, dont l'impact est étudié ci dessous.

Selon les théories de percolation [114, 208], l'apparition d'un mode de combustion de goutte isolée ne peut être envisagée que si la distance inter-goutte S est suffisante pour contenir une flamme sphérique autour d'une goutte (cf. Sect. 8.2.3). Les valeurs de S et du diamètre de flamme d_f sont obtenues par les équations 8.9 et 8.22 respectivement, en considérant la goutte à sa température

d'ébullition pour les conditions thermodynamiques locales. Lorsque $S/d_f \lesssim 1$, la goutte ne peut pas bruler en combustion isolée. Le rapport S/d_f obtenu pour la configuration étudiée est présenté en Fig. 11.26. Dans la flamme en M, la combustion de goutte isolée ne peut pas être obtenue pour deux raisons : le spray est très dense (S petit) et la fraction d'oxygène est nulle (d_f infini). La transition $S/d_f = 1$ se fait juste en aval du front de flamme, où la distance inter-gouttes augmente et où les gouttes se mélangent avec l'air. En dehors de la flamme en M, une combustion de goutte isolée peut donc être obtenue selon ce critère. Il reste encore à déterminer si la goutte a pu s'allumer et rester allumée jusqu'à son évaporation complète.

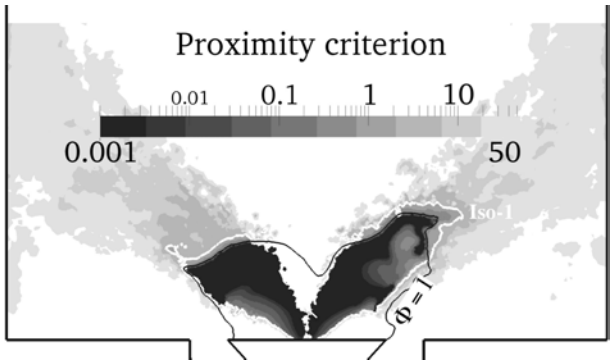

Figure 11.26 : *Critère de proximité comparant l'espacement inter-gouttes S au rayon de flamme d_f. La ligne blanche correspond à l'iso-contour $S/d_f = 1$.*

On utilise les résultats de Huang *et al.* [100] évoqués en Sect. 2.4.2.3.6 pour évaluer l'apparition de régime de combustion de gouttes isolées. A partir des Damkhöler de transition entre les trois différents régimes d'évolution de goutte (évaporation pure, mode sillage et enveloppe), Huang *et al.* proposent un indice de combustion de groupe (IGC) qui prend la valeur 0, 1 ou 2 pour l'évaporation pure, le mode sillage et le mode enveloppe, respectivement. L'évaluation de cet IGC peut également être fait *a posteriori* à partir des champs instantanés obtenus dans la simulation. Les résultat obtenus, pour la configuration étudiée, à partir d'un champ instantanée et pour deux diamètres de gouttes particuliers (SMD (40 μm) et 100 μm, qui correspond au diamètre des gouttes suffisamment grosses pour survivre dans la zone post-flamme) sont montrés en Fig. 11.27. Les gouttes sont considérées à leur température humide évaluée localement en tout point. On observe que le mode "sillage" est très rare dans cette configuration particulière. Ce résultat est cohérent avec le fait que la vitesse relative est généralement faible dans le cas présent. A l'intérieur de la flamme en M, le taux d'oxygène est trop faible pour permettre l'auto-allumage des gouttes, sauf proche de la zone de détachement du pied de flamme, où un mélange avec l'air frais est possible et où la température reste élevée. Les grosses gouttes pourraient être allumées en bordure du cône creux, proche de l'injection. En revanche, comme évalué par le critère de proximité précédent (Fig. 11.26), le spray est trop dense dans cette région pour permettre au mode "enveloppe" d'apparaitre. Enfin, les gouttes peuvent s'allumer dans le front de flamme, où les conditions sont optimales. En aval de la flamme en M, les conditions locales sont suffisantes pour activer et maintenir la

combustion de goutte isolée uniquement pour les grosses gouttes. Etant donné le fait que certaines gouttes présentes dans cette zone ont encore une taille significative (Fig. 11.22), ce résultat est particulièrement pertinent.

Ces critères combinés permettent de conclure qu'une combustion de goutte isolée a certainement lieu dans la zone IV (Fig. 11.11). Dans la simulation présentée ici, les gouttes s'évaporent selon le modèle *AS*, qui ne considère jamais le cas de la combustion de goutte isolée, au contraire du modèle *MuStARD*, développé au chapitre 8. Dans le chapitre suivant, le modèle *MuStARD* est appliqué à la configuration de cambridge et les résultats sont comparés à la simulation standart *AS* du présent chapitre.

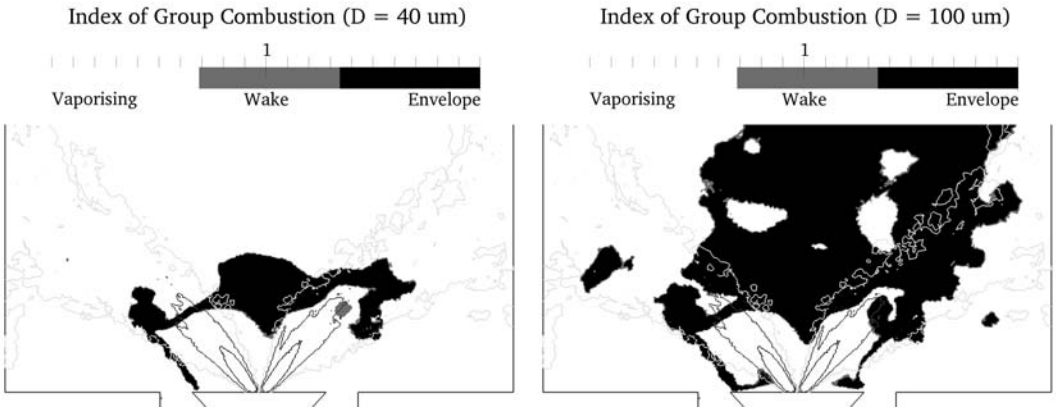

Figure 11.27 : *Indice de combustion de groupe (IGC [100]) pour deux diamètres différents (40 µm and 100 µm). Trois modes sont possibles : évaporation pure, flamme sillage ou flamme enveloppe. La position du spray est illustrée par les iso-contours de fraction volumique de liquide.*

Chapitre 12

Simulation LES du brûleur Cambridge avec le modèle *MuStARD*

Sommaire

12.1 Champs moyens de la phase gazeuse **231**
12.2 Champs moyens de la phase liquide **235**
12.3 Analyse de la structure de flamme instantanée **239**
12.4 Conclusions du chapitre **243**

La simulation de l'expérience décrite en Chap. 10 est réalisée à nouveau en utilisant le modèle *MuStARD*, développé au Chap. 8. Dans ce chapitre, le comportement obtenu avec le modèle *MuStARD* est comparé au comportement obtenu dans la simulation *AS*, avec modèle d'évaporation seul.

12.1 Champs moyens de la phase gazeuse

Tout d'abord, les champs moyens de la phase gazeuse issus des simulations *AS* et *MuStARD* sont comparés. Après une phase transitoire de stabilisation, les calculs ont été moyennés sur environ 100 ms de temps physique. Ce temps de moyenne est suffisant pour obtenir une bonne convergence de l'écoulement et des grandeurs thermodynamiques, sauf dans la zone directement en aval des lâchers de tourbillons (Fig. 11.6), pour laquelle il aurait fallu moyenner sur un plus long temps physique.

L'activation du modèle *MuStARD* ne modifie pas fondamentalement la stabilisation en M et la structure de la flamme, ni la forme de l'écoulement. L'écoulement moyen présente les mêmes caractéristiques dans les deux calculs (Fig. 12.1) : angle de jet, zone de recirculation et intensité de l'écoulement sont similaires. Les champs de température moyenne (Fig. 12.2) sont également assez

similaires, avec une zone chaude intérieure à la flamme en M, refroidie par l'évaporation du spray, une température maximale dans la zone de réaction et une dilution intense avec les gaz frais, en aval de la flamme.

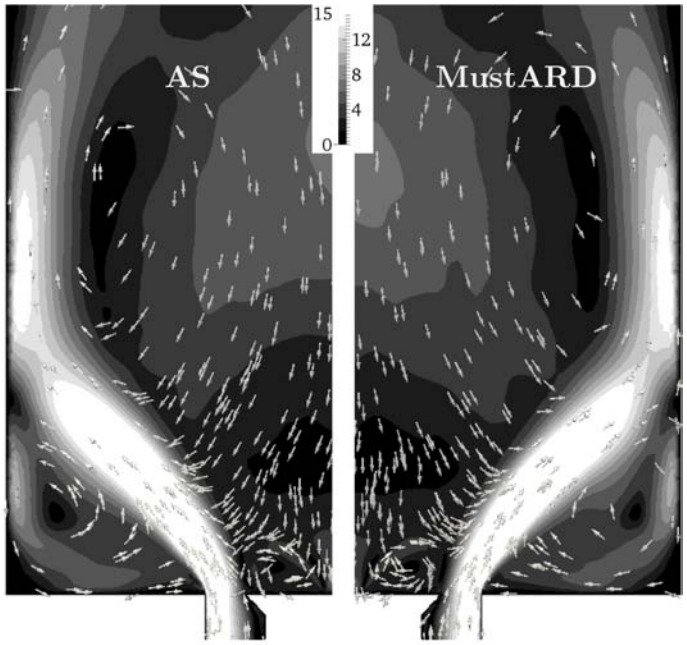

Figure 12.1 : *Comparaison AS/ MuStARD des champs de vitesse gazeuse moyenne obtenue dans le plan central. Seule la moitié de la chambre est représentée pour chaque calcul.*

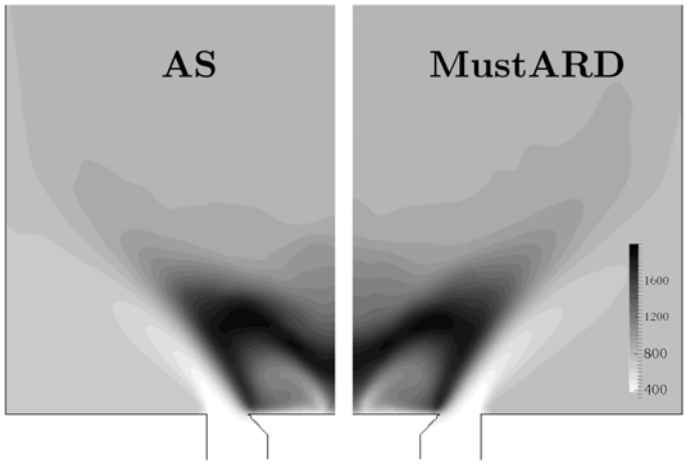

Figure 12.2 : *Comparaison AS/ MuStARD des champs de température gazeuse moyenne obtenue dans le plan central. Seule la moitié de la chambre est représentée pour chaque calcul.*

Les zones de dégagement de chaleur sont similaires pour les simulations *AS* et *MuStARD* (Fig. 12.3), malgré un mécanisme de production différents, comme déjà évoqué précédemment (Chap.

9). Dans la simulation AS, le dégagement de chaleur est exclusivement issu des réactions en phase gazeuse après transfert de masse par évaporation de la phase liquide, tandis qu'une partie du dégagement de chaleur du calcul *MuStARD* est issu de la combustion en gouttes isolées à l'intérieur du spray.

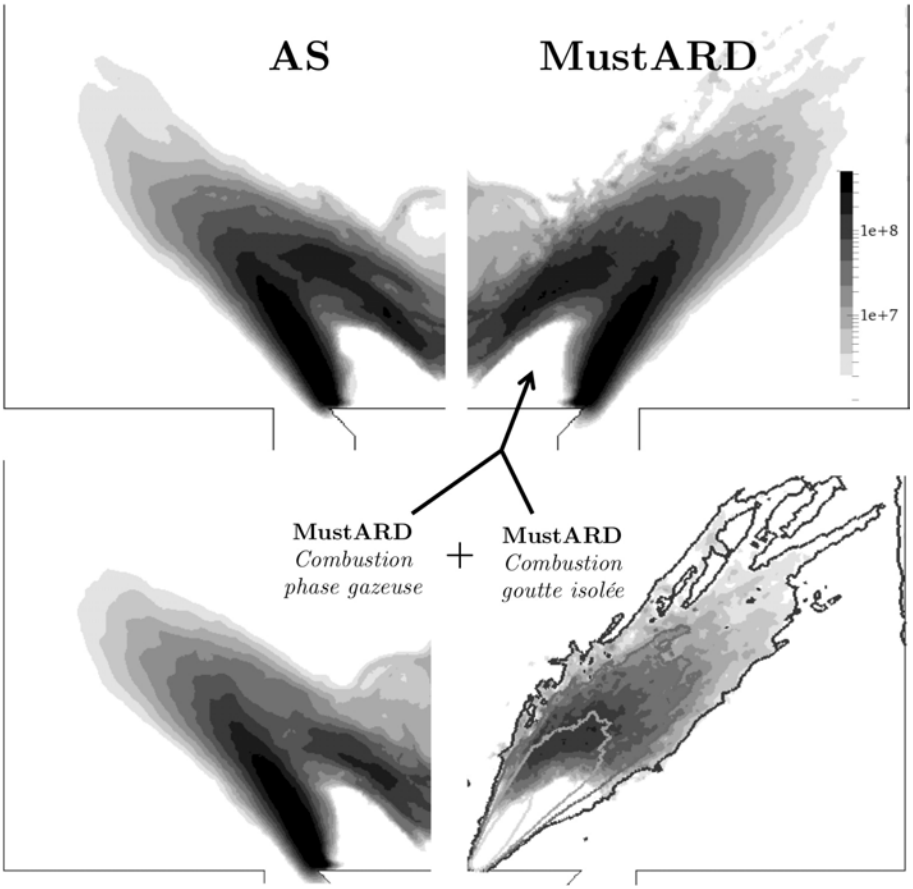

Figure 12.3 : *Comparaison AS/ MuStARD du taux de dégagement de chaleur moyen obtenu dans le plan central (haut). Seule la moitié de la chambre est représentée pour chaque calcul. Pour le modèle MuStARD, le dégagement de chaleur est la somme des contributions des réactions de la phase gazeuse (bas gauche) et de la combustion en gouttes isolées (bas droite, avec iso-contours de fraction volumique de liquide).*

En analysant le taux de dégagement intégré dans la chambre de combustion (Fig. 12.4), on remarque l'une des principales différences entre les deux modèles : dans le cas AS, la puissance moyenne dans la chambre est de 5,16 kW, ce qui correspond à une efficacité de combustion de 95 %, tandis que la puissance obtenue avec le modèle *MuStARD* est de 5,38 KW (99 % d'efficacité), dont 17 % sont fournis par la combustion de gouttes isolées. Ainsi, la simulation *MuStARD* prédit un taux de dégagement de chaleur total supérieur à la simulation AS et une combustion presque complète. Malheureusement, aucun diagnostic suffisamment précis n'est disponible dans l'expérience pour déterminer exactement le rendement de combustion, et donc le modèle le plus

pertinent. La mesure des imbrûlés en sortie de chambre de combustion, qui indique que la combustion expérimentale n'est effectivement pas complète, ne permet pas de conclure sur la puissance réelle du brûleur, du fait d'une trop grande incertitude liée à la méthode de mesure. La vapeur de carburant subsistant en post-flamme dans les deux simulations, est représentée en Fig. 12.5. Bien que la fraction massique résiduelle soit très faible dans les deux cas, on observe bien une quantité d'imbrûlés plus importante dans la simulation *AS* que dans la simulation *MuStARD*.

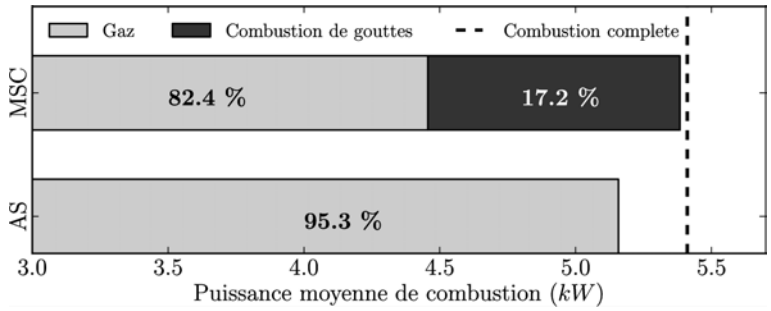

Figure 12.4 : *Puissance moyenne du brûleur pour les deux modèles, par rapport à la puissance issue de la combustion complète du carburant injecté. Pour le modèle MuStARD, la puissance est générée par les contribution de la combustion gazeuse et de la combustion de goutte isolée.*

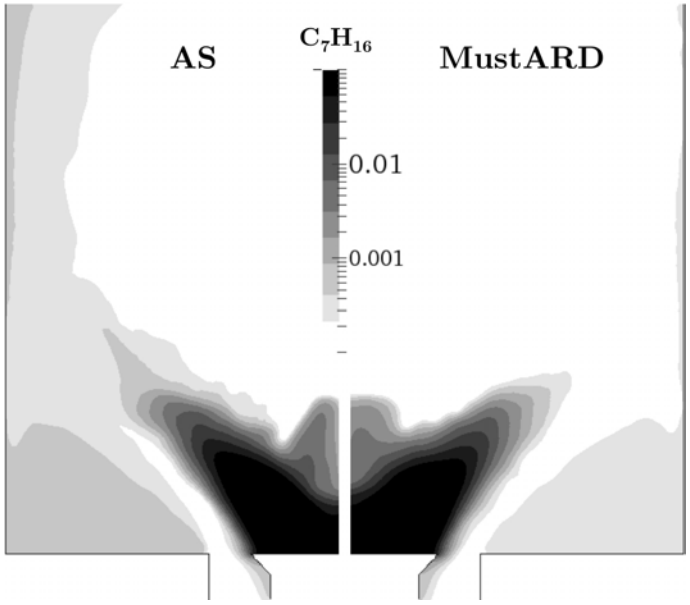

Figure 12.5 : *Comparaison AS/ MuStARD des champs de fraction massique moyenne de carburant obtenus dans le plan central. Seule la moitié de la chambre est disposée pour chaque calcul.*

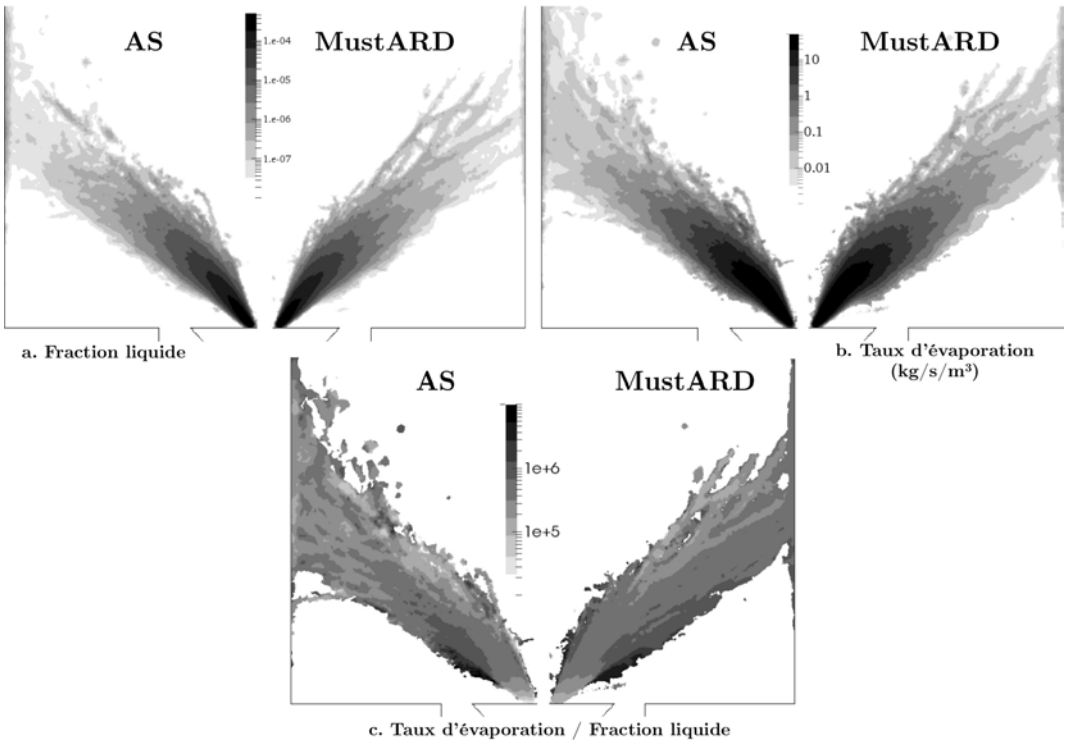

Figure 12.6 : *Comparaison AS/ MuStARD de la fraction volumique liquide (a.), du taux d'évaporation (b.) et du rapport entre les deux (bas). Seule la moitié de la chambre est disposée pour chaque calcul.*

12.2 Champs moyens de la phase liquide

L'influence du modèle *MuStARD* sur le comportement moyen de la phase liquide apparait essentiellement en aval de la zone de réaction en M. La charge moyenne en carburant liquide (Fig. 12.6 a.), similaire proche de l'injection, est moins importante en post-flamme dans le cas *MuStARD* : le carburant liquide résiduel après la zone principale de réaction est donc plus important lorsque la combustion de goutte isolée n'est pas prise en compte. Les mêmes caractéristiques sont observées pour le taux d'évaporation (Fig. 12.6 b.), fortement lié à la quantité de gouttes présentes localement. En rapportant le taux d'évaporation à la charge liquide, il est possible de localiser les zones où l'évaporation individuelle des gouttes est plus intense. La figure 12.6 c. montre une croissance rapide du taux d'évaporation proche de l'injection, du fait de la présence de gaz chauds, puis une stabilisation dans le coeur du spray et finalement une décroissance dans la zone de dilution avec les gaz frais. On remarque une zone périphérique autour du spray où l'évaporation ramenée à la masse liquide est très importante ($\sim 10^7$). Du fait des mouvements de recirculation, cette zone est fortement chargée en petites gouttes, dont le taux d'évaporation est très grand relativement à leur taille, puisque leur temps de préchauffage est plus faible que pour les grosses gouttes. En aval de

la zone de réaction principale, le taux d'évaporation diminue moins fortement dans la simulation *MuStARD* que dans la simulation *AS*.

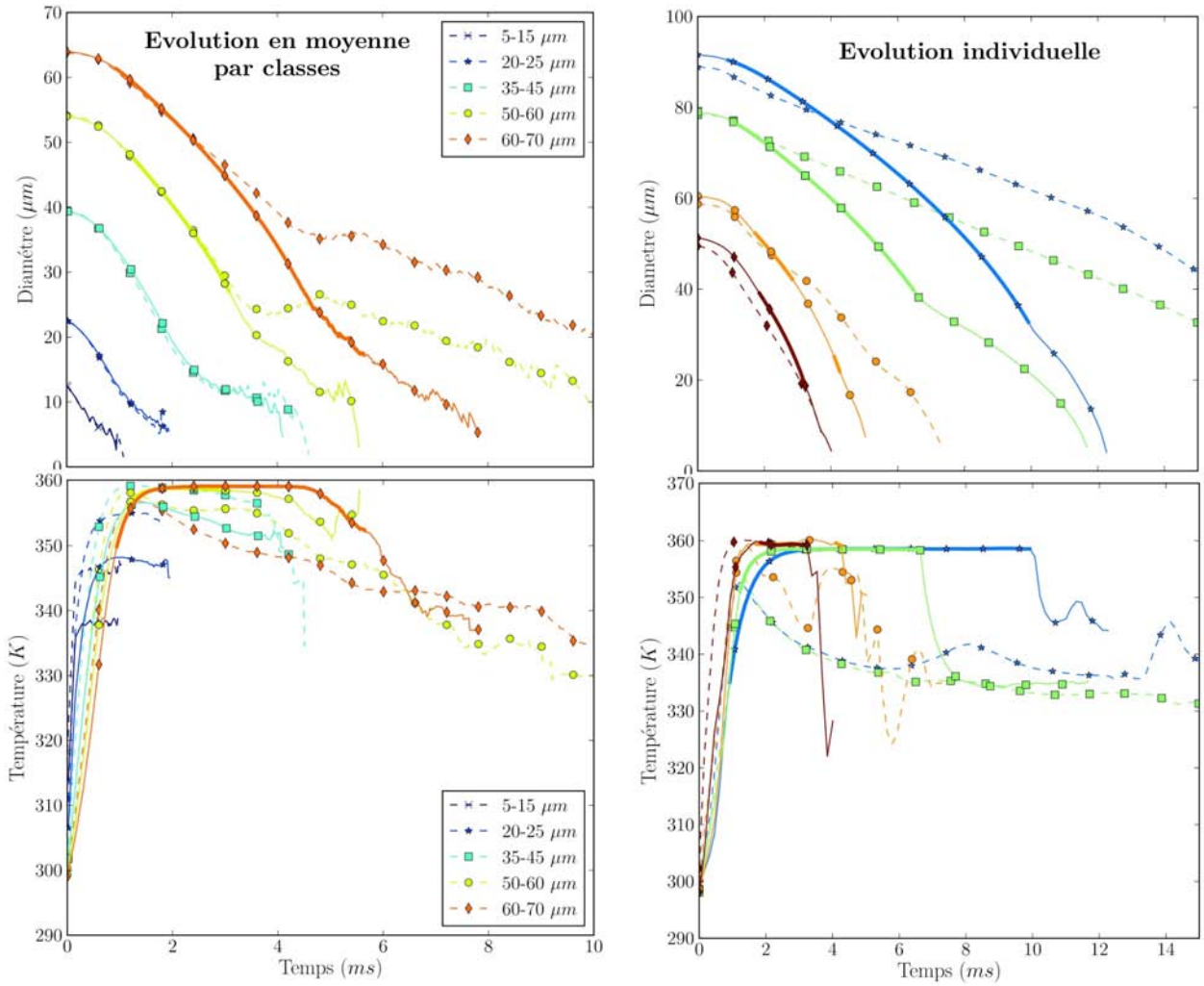

Figure 12.7 : *Evolutions temporelles moyennes du diamètre et de la température pour différentes classes de diamètre* ***initial*** *de gouttes (gauche) et évolutions individuelles de quelques gouttes depuis leur injection. Lignes pointillées : AS ; Lignes pleines : MuStARD. Le mode de combustion de goutte isolée pour MuStARD est activé lorsque le trait plein est gras.*

Pour illustrer cette différence de comportement entre les deux modèles, l'évolution temporelle moyenne de différentes classes de gouttes est analysée. Une classe correspond ici à l'ensemble des gouttes dont le diamètre **initial** est compris dans un intervalle donné. Le comportement temporel moyen pour 5 classes de diamètres initiaux est présenté en Fig. 12.7. Pour toutes les classes, le comportement moyen est très similaire pour les deux modèles, en termes de décroissance du diamètre et d'évolution de la température de la goutte jusqu'à 4 ms, temps de vie de goutte atteint uniquement par les gouttes de plus de 40 μm et qui correspond au moment où les gouttes

atteignent la zone de dilution par les gaz frais. Le modèle d'évaporation seul dans la simulation *AS* (lignes pointillées) prédit alors une baisse significative de la température des gouttes et de la pente de décroissance du diamètre de goutte, tandis que ces deux quantités se maintiennent stable avec le modèle *MuStARD*, grâce à l'activation de la combustion de gouttes isolées en aval de la zone de réaction. Le temps de vie moyen des gouttes dans la zone de dilution est donc plus faible pour le modèle *MuStARD* que pour le modèle d'évaporation seul. Vers la fin de la vie des gouttes allumées dans le modèle *MuStARD* (Classes $50-70\ \mu m$), le critère d'extinction s'active du fait de la taille des gouttes, devenue très petite. Les gouttes s'éteignent, et l'évolution de la température et la pente de décroissance du diamètre devient à nouveau similaire aux évolutions dans la simulation *AS*.

L'évolution moyenne de la population de gouttes le long de l'axe de la chambre est analysée en traçant la distribution en diamètre des gouttes contenues dans différentes tranches superposées le long de l'axe de la chambre de combustion et comprise entre les coordonnées Y_- et Y_+ (Fig. 12.8). La distribution est fournie en volume (volume occupé par une classe de diamètre de goutte), et également en contribution au taux d'évaporation. De plus, pour le modèle *MuStARD*, les contributions de chaque mode (E ou V) sont indiqués. Enfin, les pourcentages en Fig. 12.8 représentent le rapport entre le taux d'évaporation total mesuré dans la tranche (en fonction du mode pour *MuStARD*) et le débit liquide entrant ($0,12\ g/s$). En régime stationnaire, la quasi-totalité du débit liquide entrant s'évapore. La somme des pourcentages pour chacun des deux modèles est donc proche de 100%.

Dans la première tranche (0-10 mm), les deux modèles présentent un comportement similaire, puisque la contribution du mode E de *MuStARD* est très faible dans cette région très pauvre en oxygène (absence de partie noire dans la distribution). Au delà de 10 mm du point d'injection, le mode E commence à s'activer ($4,7$ % du taux d'évaporation total, dans cette tranche). L'activation du mode E concerne en majorité les diamètres supérieurs à 20 μm : les gouttes plus petites ne s'allument pas à cause du critère d'extinction en diamètre ($d_{ext} \sim 20\ \mu$ avec ces conditions locales). Pour la tranche 15-20 mm, qui correspond à la zone de réaction, le taux d'évaporation entre simulation *AS* et *MuStARD* est similaire pour un volume liquide équivalent, puisque le comportement de l'évaporation à haute température est proche de celui d'une goutte allumée, comme vu précédemment. A partir de 20 mm, la grande majorité des gouttes restantes sont en mode E. On remarque que dans la tranche $20-30$ mm, le taux d'évaporation entre les deux modèles est sensiblement équivalent, pour un volume de goutte beaucoup moins important en *MuStARD*. En effet, comme vu précédemment, le mode E contribue de manière plus importante à l'évaporation pour un volume liquide équivalent. Globalement, la quantité de carburant liquide présente dans la chambre en régime stationnaire est plus importante dans la simulation *AS* que dans la simulation *MuStARD*, mais le taux d'évaporation total généré par cette quantité liquide est le même pour les deux modèles. Au delà de 30 mm, le mode E est moins présent, puisque les grosses gouttes allumées initialement atteignent progressivement leur diamètre d'extinction, ou rencontrent un zone d'écoulement trop intense pour maintenir leur mode de combustion (extinction

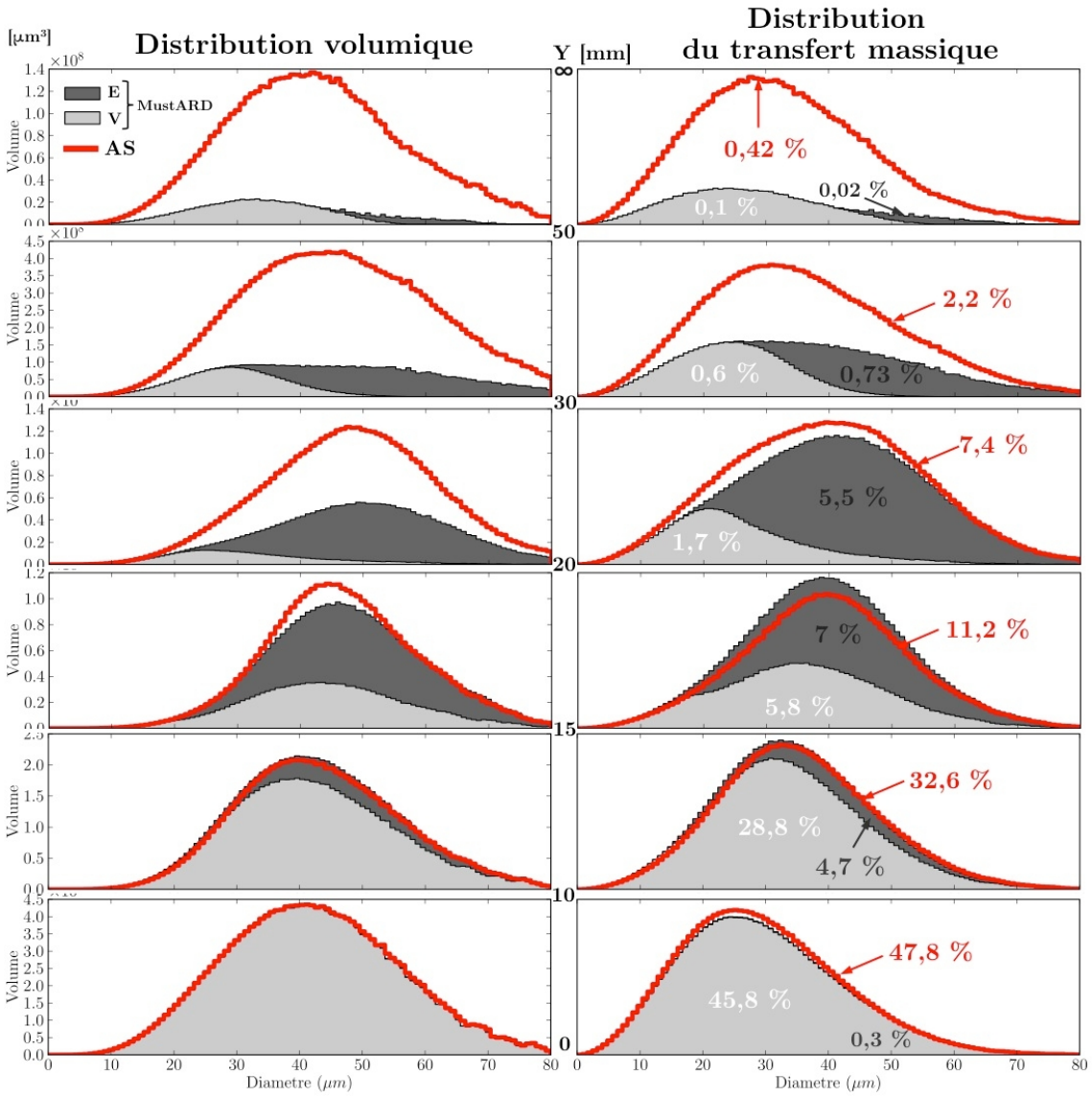

Figure 12.8 : *Evolution spatiale des populations de gouttes pour différentes tranches successives le long de l'axe de la chambre (bornes inférieures et supérieures d'abscisses Y (mm), matérialisées en Fig. 12.9). Distributions volumiques à gauche, et contributions au taux d'évaporation en pourcentage du taux d'évaporation total ($\sim 0.12\ g/s$). Pour MuStARD, l'état des gouttes (V ou E) est distingué.*

par soufflage). Dans la dernière tranche, toutes les gouttes de diamètre inférieur à 40 μm sont éteintes. Cette analyse permet d'illustrer la contribution importante du mode de combustion de goutte isolée à la combustion du spray.

Une carte de probabilité de présence conditionnée par le diamètre initial et par l'état de la goutte (V ou E) est proposée pour 3 classes de diamètres initiaux, en Fig. 12.9. La zone $T > 1500K$ et $Y_{O_2} > 10^{-2}$, propice à l'allumage de goutte isolée, est matérialisée en gris. La probabilité de

présence d'une goutte de chaque classe est illustrée par des iso-contours continus pour le mode V (évaporation) et en pointillés pour le mode E (mode "enveloppe"). Pour la simulation AS, ne disposant que du mode V, on observe une pénétration des gouttes du spray qui augmente avec le diamètre initial de gouttes. Les petites gouttes ralentissant et s'évaporant plus rapidement, ne sont présentes que proche de l'injection. Pour le modèle *MuStARD*, on remarque que la combustion de goutte isolée ne s'active ni proche de l'injecteur, du fait de la densité trop forte qui active le critère de proximité, ni dans la zone interne au M, du fait de l'absence d'oxygène. La combustion de goutte isolée ne s'active qu'à partir du moment où la zone propice à l'allumage (oxygène et température suffisants) est atteinte. Pour *MuStARD*, la classe $[0-20]\,\mu m$ est très similaire à la simulation AS, puisque les petites gouttes n'arrivent pas à s'allumer. De même, la classe $[30-50]\,\mu m$, qui présente un nombre relativement faible de gouttes allumées dans la simulation *MuStARD*, a une répartition similaire à la simulation AS. Le mode E s'active dès l'entrée de la zone propice à l'allumage. Toutes les gouttes de la classe $[30-50]\,\mu m$ se sont évaporées avant de sortir de cette zone. Enfin, la classe de grand diamètre initial ($[60-100]\,\mu m$) présente des différences notables de répartition entre les deux modèles, liées à une forte implication du mode de combustion de goutte isolée pour cette classe. Ce dernier est essentiellement présent dans la zone propice à la combustion, puis se maintient en aval, avant de disparaître du fait de l'extinction des gouttes. La pénétration du jet de grosses gouttes est plus faible pour *MuStARD* que pour AS, puisque leur temps de vie moyen est inférieur dans le mode E.

L'étude de la phase liquide par classe de diamètre **initial** permet de répondre à certaines questions pertinentes pour la conception, comme par exemple : quelle distance parcourent les gouttes d'un diamètre donné ? Comment se répartissent les gouttes de petit diamètre initial ? Dans quelles régions s'active tel régime de combustion, pour quel diamètre d'injection ? Ces informations peuvent notamment permettre d'adapter la distribution physique à l'injection pour obtenir une répartition plus convenable.

12.3 Analyse de la structure de flamme instantanée

Le comportement individuel de certaines gouttes est comparé dans les deux simulations en Fig. 12.7 (droite). Les tendances moyennes observées précédemment sont retrouvées sur le comportement individuel : les gouttes de diamètre initial inférieur à 30 μm ont un comportement similaire pour les deux modèles, le mode E ne s'activant que peu pour ces gouttes. Entre 40 et 60 μm de diamètre initial, les deux modèles présentent des comportements similaires, même si le mode E s'active dans le modèle *MuStARD*. Pour l'une des gouttes (diamètre initial de 60 μm), on remarque un premier allumage suivi d'une extinction puis d'un ré-allumage. Ce comportement est observé lorsque la flamme présente une branche réactive qui s'enroule ("cusp", Fig. 12.10) : la goutte traverse une première fois dans le sens carburant $\rightarrow$ oxygène en s'allumant, puis une deuxième fois dans le sens oxygène $\rightarrow$ carburant, elle s'éteint alors, du fait de l'absence d'oxygène, puis se ré-allume en retraversant une dernière fois le front de flamme dans le sens carburant $\rightarrow$ oxygène.

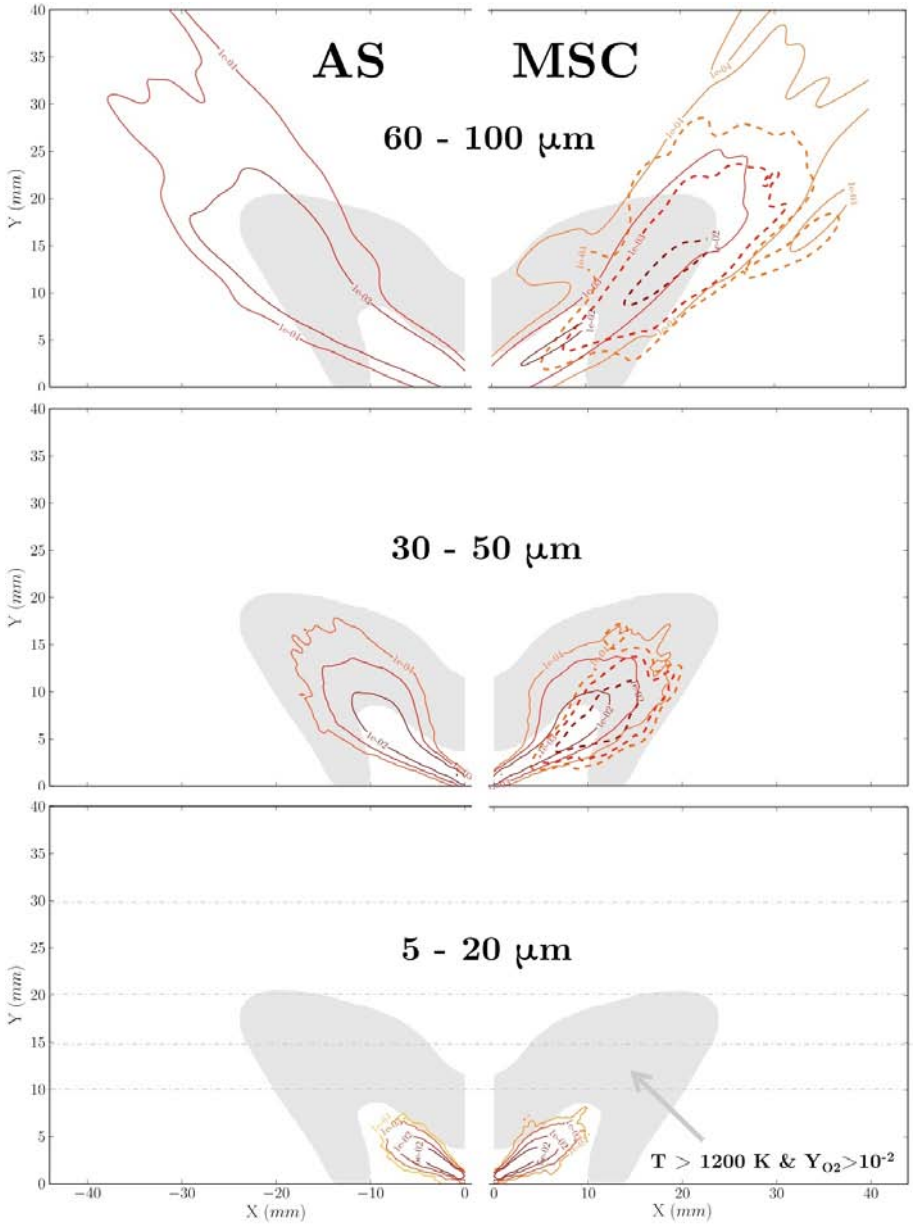

Figure 12.9 : *Carte de probabilité de présence conditionnée par le diamètre initial et par l'état de la goutte, pour la simulation AS (gauche) et MuStARD (droite) pour trois classes de diamètre* ***initial****. Lignes continues : mode V ; Lignes pointillées : mode E. La zone* $T > 1500K$ *et* $Y_{O_2} > 10^{-2}$ *est matérialisée en gris.*

Pour les gouttes de diamètre supérieur à 60 μm, on remarque l'écart important entre simulation *AS* et *MuStARD*, lié à l'activation du mode E dans la zone de dilution par les gaz frais. On note de plus la décroissance rapide de la température liquide et du taux de décroissance du diamètre

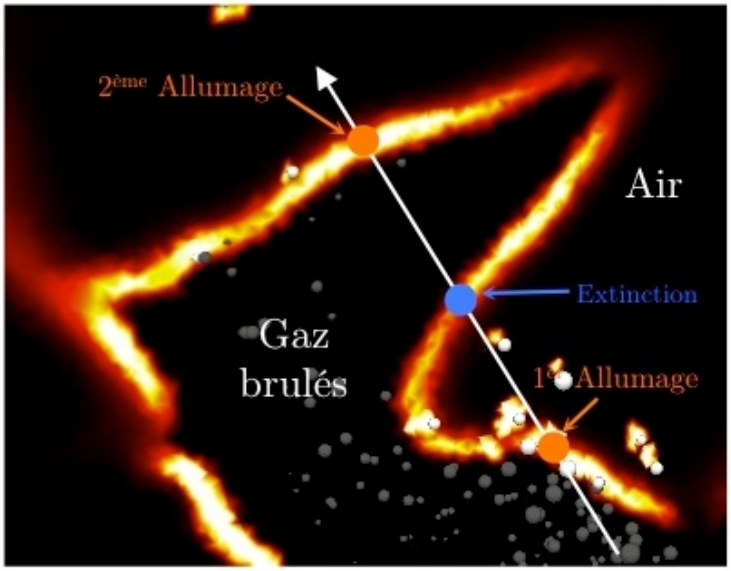

Figure 12.10 : *Comportement particulier des gouttes lorsque la flamme présente un repliement ("cusp"), dans la simulation MuStARD.*

dès l'instant où la goutte est éteinte. Le temps de vie est clairement plus faible pour les gouttes en combustion.

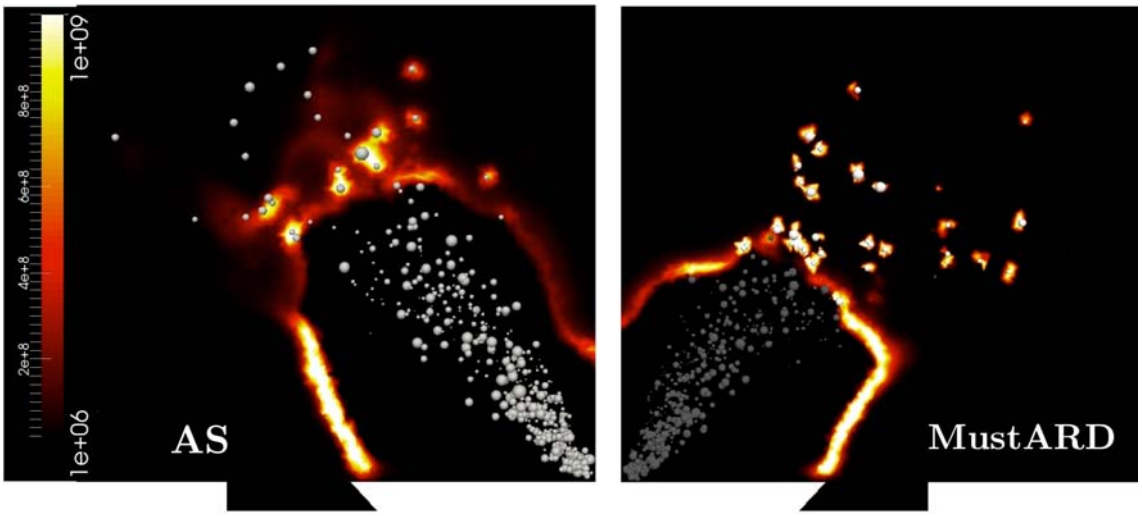

Figure 12.11 : *Dégagement de chaleur instantané, avec sur-imposition des gouttes, dont la taille est proportionnelle au diamètre de goutte. Pour MuStARD, le mode E est activé pour les gouttes colorées en blanc.*

La structure instantanée typique du dégagement de chaleur et du spray est illustrée pour les deux simulations en Fig. 12.11. Dans la simulation AS, on retrouve l'interaction caractéristique entre

spray et zone de réaction, avec un front de flamme modifié par la présence des gouttes et une zone post-flamme de combustion gazeuse locale autour des gouttes individuelles, décroissant rapidement en aval. Avec le modèle *MuStARD*, les gouttes allumées à partir du front de flamme (colorées en blanc dans Fig. 12.11) génèrent un dégagement de chaleur très marqué, lié au couplage liquide-gaz de la combustion de goutte isolée, qui subsiste en aval. Les autres branches de la flamme en M sont peu modifiées par la différence de comportement dans la zone d'interaction spray/flamme.

Deux séquences d'images montrant la structure instantanée de la flamme pour les deux modèles (Fig. 12.12) sont comparées à une séquence équivalente d'images, obtenues par OH-PLIF dans l'expérience (Fig. 12.13). Ces séquences correspondent à un temps physique de 3 ms environ et illustrent à nouveau le comportement relativement différent des deux modèles dans la zone d'activation du mode E. Hormis cette différence, les structures de flammes en M sont similaires, et présentent les mêmes caractéristiques de stabilisation, de mouvement, d'extinction locale, de lâcher de poche de gaz chaud. Lorsque l'on compare ces séquences à la séquence d'images expérimentales, on retrouve des caractéristiques similaires, en terme de plissement du front de flamme, de relâchement de poches chaudes, de combustion très locale en post-flamme, d'extinction locale.

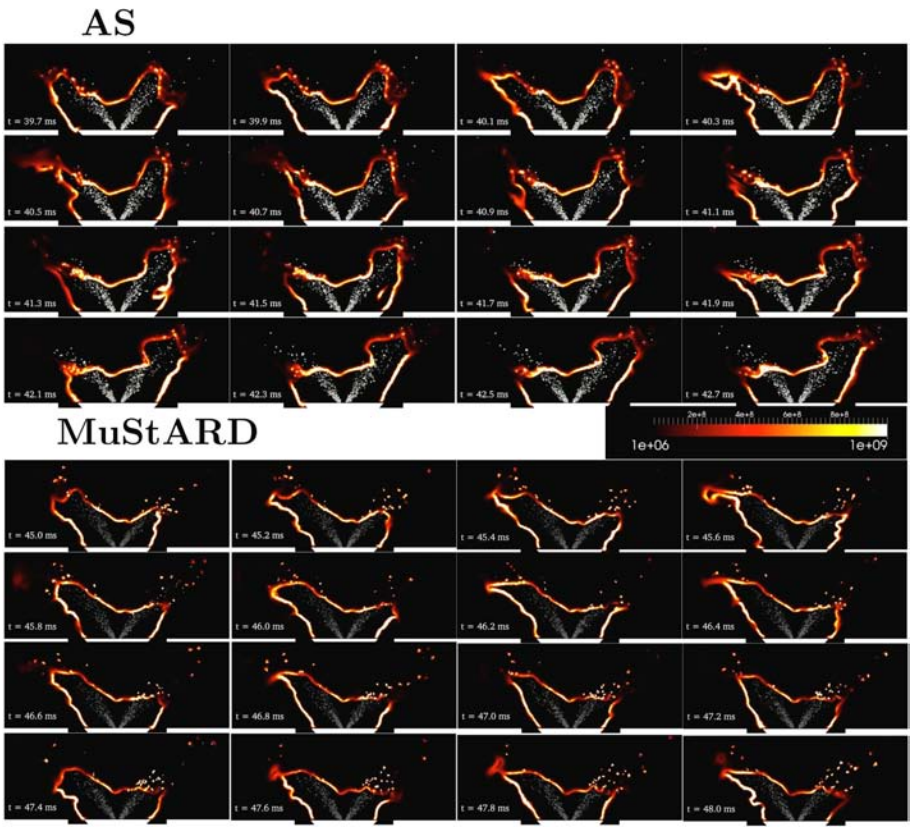

Figure 12.12 : *Séquence d'images instantanées de dégagement de chaleur, espacées de 0.2 ms, sur 3 ms de temps physique.*

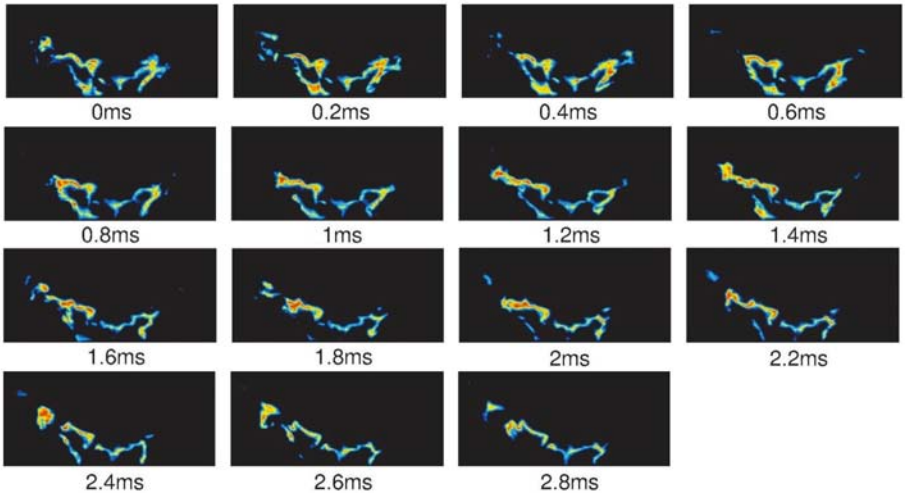

Figure 12.13 : *Séquence d'images instantanées de OH-PLIF, espacées de 0.2 ms, sur 2.8 ms de temps physique (adapté de [32]).*

12.4 Conclusions du chapitre

Sans modifier de manière significative la structure de l'écoulement et de la flamme, l'application du modèle *MuStARD* entraine des différences notables en post-flamme, avec un consommation plus importante des imbrulés et une pénétration plus courte du spray dans la chambre. Dans le cas du brûleur de Cambridge, un cinquième de la puissance totale est fournie sous la forme d'une combustion de goutte isolée. La quantité d'imbrûlés en sortie de chambre de combustion est plus faible lorsque la combustion de goutte isolée est prise en compte. Cette dernière s'active très majoritairement dans le front de flamme et se maintient en aval jusqu'à l'apparition de phénomènes d'extinction (diamètre d'extinction ou soufflage de la flamme par convection relative).

Conclusions générales et perspectives

Cette thèse a été l'occasion de poursuivre le développement du code AVBP Euler-Lagrange, en termes de fonctionnalités et d'optimisation des procédures. Une modification du principe de localisation et de transport des particules dans le maillage a été tout d'abord proposée, afin de résoudre un problème de perte de particules aux parois et d'améliorer la robustesse du transport des particules dans le maillage partitionné. Une nouvelle méthode d'injection d'une distribution en taille de goutte permettant de fournir en entrée une distribution quelconque a été également développé. Cette fonctionnalité facilite grandement la mise en donnée d'une injection lagrangienne, en permettant d'imposer directement la distribution du spray injecté en fonction d'une mesure expérimentale de la distribution de goutte de l'injecteur, sans passage par un opération d'adaptation d'une distribution usuelle, source d'incertitudes. Une méthode de traitement des erreurs point source en LES-DPS a été ensuite proposée, permettant de limiter la perturbation locale d'un point source par étalement uniforme sur un volume dépendant de la taille de la goutte. Enfin, une nouvelle répartition des particules numériques sur la distribution en taille à l'injection a été proposée, permettant d'améliorer significativement la convergence statistique d'une simulation lagrangienne par rapport aux méthodes usuelles de répartitions. Au cours de la thèse, d'autres développements prometteurs du code ainsi que des méthodes de post-traitement avancés de la phase liquide, non évoquées dans ce manuscrit, ont pu être mis en évidence et testés, et font actuellement l'objet d'un travail d'intégration.

Une autre contribution importante de cette thèse est l'amélioration de la modélisation de la combustion diphasique en LES-DPS. Dans un premier temps, une adaptation du modèle de combustion turbulente TFLES est proposée pour simuler de manière plus précise le comportement de la combustion diphasique **homogène**. Dans un deuxième temps, un modèle multi-état de combustion de goutte, appelé *MuStARD*, est proposé pour simuler de manière plus précise la combustion diphasique **hétérogène**. Ce modèle, validé étape après étape, permet de définir si une goutte ne fait que s'évaporer ou si elle est susceptible de présenter une combustion de goutte isolée, en fonction d'un critère d'allumage, d'extinction et de densité. Lorsque la goutte brûle, son évolution suit un modèle analytique de combustion de goutte, qui fournit de très bon résultats par rapport aux expériences de gouttes isolées en combustion. Le modèle *MuStARD* est validé dans des configurations de complexité croissante, puis appliqué au bruleur académique précédemment étudié. La comparaison entre une simulations ver modèle d'évaporation seul et avec le modèle *MuStARD* met

en évidence une forte influence de la prise en compte de la combustion de goutte isolée, notamment en ce qui concerne le taux de dégagement total prédit dans la simulation. L'introduction d'un certain nombre de processus physiques supplémentaires dans la simulation du spray réactif, non pris en compte par la méthode standard, avec modèle d'évaporation seul, ainsi que le bon accord de *MuStARD* avec des configuration expérimentales simples, permettent de conclure à un apport significatif du modèle *MuStARD* pour prédire la combustion d'un spray.

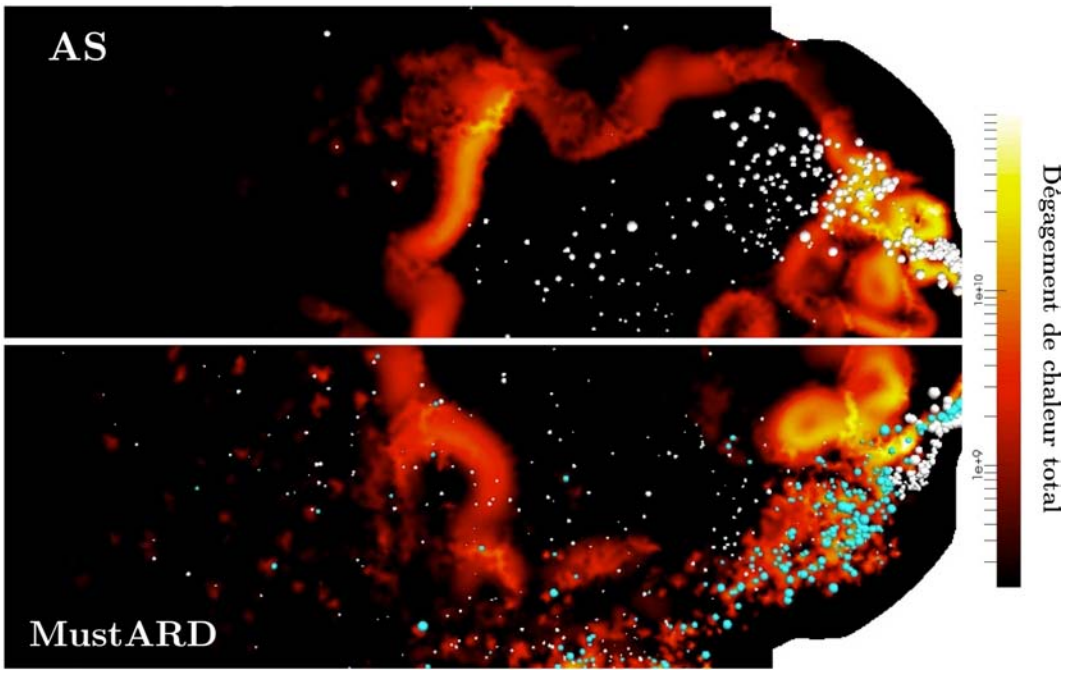

Figure 12.14 : *Illustration du comportement dans une chambre de combustion industrielle Turbomeca. Les gouttes colorées en blanc et bleu sont respectivement en mode V (évaporation pure) et en mode E (combustion de goutte isolée).*

En tout dernier lieu, le modèle *MuStARD* a fait l'objet d'une application dans une chambre de combustion industrielle *Turbomeca*, avec une procédure de mise en donnée pouvant être généralisée notamment à d'autres carburants et d'autre points de fonctionnement, et prenant en compte autant que possible les contraintes liées à une utilisation en bureau d'étude dans le futur. Pour des raisons de confidentialité, cette simulation n'est pas détaillée dans ce manuscrit. Elle met en évidence la présence de combustion de goutte isolée, comme illustré en Fig. 12.14. L'influence du modèle *MuStARD* sur la prédiction du profil de température en sortie de chambre, de la structure de flamme, des limites d'extinction et de ré-allumage du moteur, fera l'objet d'études dans le futur.

A la fin de cette thèse, quelques perspectives d'amélioration de la modélisation de la combustion diphasique en LES-DPS peuvent être dégagées :

– **Amélioration des critères de changement d'état dans *MuStARD*** : La modélisation a mis en évidence un certain nombre de points à améliorer : prise en compte du comportement de

l'auto-allumage des gouttes à basse température ($< 1000\ K$), critère d'extinction en soufflage, prise en compte de l'extinction due aux pertes par rayonnement.

- **Amélioration du modèle de combustion de goutte isolée** : le modèle pourrait être amélioré en prenant en compte l'influence de l'écoulement autour de la goutte, l'influence de la structure thermique interne de la goutte, les effets liés à l'accumulation instationnaire de carburant autour de la goutte, les émissions de polluants liés à la présence d'une flamme de diffusion etc. De plus, le mode de combustion de goutte présentant une flamme dans le sillage de la goutte pourrait être introduit, comme état supplémentaire d'évolution de la goutte.
- **Modélisation de la combustion diphasique homogène en sous-maille** : l'influence d'un spray homogène sur la combustion turbulente en sous-maille pourrait être prise en compte de manière plus précise en analysant le comportement à l'échelle de sous maille de la combustion diphasique homogène en présence de turbulence.
- **Traitement de l'erreur point-source** : cette thèse a mis en évidence les erreurs de prédiction croissantes liées au non-respect de l'hypothèse de non-perturbation dans l'approche point-source en LES-DPS. Une ébauche de méthodologie de traitement a été proposée, mais nécessiterait un travail de recherche plus abouti, pour être proprement traité et anticiper les problèmes liés aux raffinements continus des maillages LES.

Bibliographie

[1] B. Abramzon and S. Sazhin. Droplet vaporization model in the presence of thermal radiation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48 :1868–1873, 2005. citée en p. 92, 153

[2] B. Abramzon and W. A. Sirignano. Droplet vaporisation model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 9 :1605–1618, 1989. citée en p. 5, 91, 95, 207

[3] Suresh K. Aggarwal. Single droplet ignition : Theoretical analyses and experimental findings. *Progress in Energy and Combustion Science*, 45 :79,Äì107, 2014. citée en p. 28, 155

[4] F. Akamatsu, Y. Mizutani, M. Katsuki, S. Tsushima, and Y. D. Cho. Measurement of the local group combustion number of droplet clusters in a premixed spray stream. *Proceedings of the Combustion Institute*, 26 :1723–1729, 1996. citée en p. 42, 47

[5] K. Annamalai and W. Ryan. Interactive processes in gasification and combustion. part 1 : Liquid drop arrays and clouds. *Progress in Energy and Combustion Science*, 18 :221–295, 1992. citée en p. 36, 40, 41, 42, 228

[6] Y. Aouina, U. Maas, E. Gutheil, U. Riedel, and J. Warnatz. Mathematical modeling of droplet heating, vaporization, and ignition including detailed chemistry. *Combustion Science and Technology*, 173 :1–23, 2001. citée en p. 31

[7] I. Awasthi, G. Gogos, and T. Sundararajan. Effects of size on combustion of isolated methanol droplets. *Combustion and Flame*, 160 :1789–1802, 2013. citée en p. 32, 35, 169

[8] I. Awasthi, D. N. Pope, and G. Gogos. Effects of the ambient temperature and initial diameter in droplet combustion. *Combustion and Flame*, 161 :1883–1899, 2014. citée en p. 32, 166

[9] Y. Baba and R. Kurose. Analysis and flamelet modelling for spray combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 612 :45–79, 2008. citée en p. 52

[10] A. Bader, P. Keller, and C. Hasse. The influence of non-ideal vapor/liquid equilibrium on the evaporation of ethanol/iso-octane droplets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 64 :547–558, 2013. citée en p. 92

[11] S. Balachandar and John K. Eaton. Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42 :111–133, 2010. citée en p. 25, 26

[12] K. D. Bartle, E. M. Fitzpatrick, J. M. Jones, M. L. Kubacki, R. Plant, M. Pourkashanian, A. B. Ross, and A. Williams. The combustion of droplets of liquid fuels and biomass particles. *Fuel*, 90 :1113–1119, 2011. citée en p. 32

[13] A. B. Basset. *Treatise on Hydrodynamics*, volume 2. Deighton Bell, London, 1888. citée en p. 83

[14] G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988. citée en p. 92

[15] C.H. Beck, R. Koch, and H. J. Bauer. Identification of droplet burning modes in lean, partially prevaporized swirl-stabilized spray flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :2195–2203, 2009. citée en p. 33, 34, 41

[16] C.H. Beck, R. Koch, and H.J. Bauer. Numerical investigation of the time scales of single droplet burning. *Flow, Turbulence and Combustion*, 82 :571–598, 2009. citée en p. 27, 33, 34

[17] Josette Bellan and Martin Summerfield. Theoretical examination of assumptions commonly used for the gas phase surrounding a burning droplet. *Combustion and Flame*, 33 :107–122, 1978. citée en p. 92

[18] Robert W. Bilger. A mixture fraction framework for the theory and modeling of droplets and sprays. *Combustion and Flame*, 158 :191–202, 2011. citée en p. 36, 58, 60, 170, 202

[19] M. Bini and W. P. Jones. Large eddy simulation of an evaporating acetone spray. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30 :471–480, 2009. citée en p. 55

[20] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lighfoot. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960. citée en p. 91

[21] Madjid Birouk and Iskender Gokalp. Current status of droplet evaporation in turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :408–423, 2006. citée en p. 27

[22] M. Boileau. *Simulation aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. citée en p. 50, 142, 147

[23] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinsot, and C. Bérat. Les of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combustion and Flame*, 154 :2–22, 2008. citée en p. 59

[24] Marc Boivin, Olivier Simonin, and Kyle D Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 375 :235–263, 1998. citée en p. 25, 26

[25] G. Borghesi, E. Mastorakos, and R. S. Cant. Complex chemistry DNS of n-heptane spray autoignition at high pressure and intermediate temperature conditions. *Combustion and Flame*, 160 :1254–1275, 2013. citée en p. 53, 58

[26] R. Borghi. Background on droplets and sprays. In *Combustion and turbulence in two phase flows, Lecture Series 1996-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996. citée en p. 37, 42

[27] R. Borghi. The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling. *Transport phenomena in combustion*, 1996. citée en p. 42

[28] J. Boussinesq. *Théorie Analytique de la Chaleur*, volume 2. Ecole Polytechnique, Paris, 1903. citée en p. 83

[29] M. Burger, R. Schmehl, K. Prommersberger, O. Schaefer, R. Koch, and S. Wittig. Droplet evaporation modeling by the distillation curve model : accounting for kerosene fuel and elevated pressures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46 :4403–4412, 2003. citée en p. 92

[30] S. Candel, F. Lacas, N. Darabiha, and J. Rolon. Group combustion in spray flames. *Multiphase Science and Technology*, 11 :1–18, 1999. citée en p. 40

[31] D. Cavaliere. PhD thesis, University of Cambridge, 2013. citée en p. 199, 213

[32] D.E Cavaliere, J. Kariuki, and E. Mastorakos. A comparison of the blow-off behaviour of swirl-stabilized premixed, non-premixed and spray flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 91 :347–372, 2013. citée en p. 48, 195, 197, 198, 211, 217, 243

[33] CERFACS. *AVBP Handbook - http ://cerfacs.fr/∼ avbp/AVBP_ V5.X/HANDBOOK*. CERFACS, 2009. citée en p. 95

[34] B. H. Chao, C. K. Law, and J. S. Tien. Structure and extinction of diffusion flames with flame radiation. In *Progress in Energy and Combustion Science*, pages 523–531, 1991. citée en p. 35, 169

[35] S. Chapman and T. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 3rd edition, 1970. citée en p. 68

[36] F. Charlette, D. Veynante, and C. Meneveau. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part i - non-dynamic formulation and initial tests. *Combustion and Flame*, 131 :159–180, 2002. citée en p. 76, 206

[37] G. Chaussonnet. *Modeling of liquid film and breakup phenomena in Large-Eddy Simulations of aeroengines fueled by airblast atomizers*. PhD thesis, INP Toulouse, 2014. citée en p. 61, 103

[38] Geoffroy Chaussonnet. Modeling of liquid film and breakup phenomena in large-eddy simulations of aeroengines fueled by airblast atomizers, 2014. citée en p. 99

[39] J. Chen and X. Peng. An approach of droplet ignition delay time. *Heat Transfer - Asian Research*, 38 :73–82, 2009. citée en p. 155, 156

[40] K. S. Chen and J. Y. Hwang. Experimental study on the mixing of one- and dual-line heated jets with a cold crossflow in a confined channel. *AIAA Journal*, 29 :353–360, 1991. citée en p. 42

[41] Z. Chen, M. P. Burke, and Y. Ju. Effects of lewis number and ignition energy on the determination of laminar flame speed using propagating spherical flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :1253–1260, 2009. citée en p. 31

[42] H. H. Chiu and E. J. Croke. Group combustion of liquid fuel sprays. Energy Technology Lab 81-2, University of Illinois, Chicago, 1981. citée en p. 40

[43] H.H. Chiu. Advances and challenges in droplet and spray combustion. i. toward a unified theory of droplet aerothermochemistry. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26 :381–416, 2000. citée en p. 31, 34, 94, 226

[44] H.H. Chiu and L.H. Hu. Dynamics of ignition transience and gasification partition of a droplet. *Symposium (International) on Combustion*, 27 :1889–1896, 1998. citée en p. 31

[45] H.H Chiu and J.S. Huang. Multiple-state phenomena and hysteresis of a combusting isolated droplet. *Atomization and Sprays*, 6 :1–26, 1996. citée en p. 34, 36, 59, 60, 152, 153, 170

[46] H.H. Chiu, H.Y. Kim, and E.J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. *Symposium (International) on Combustion*, 19 :971–980, 1982. citée en p. 7, 40

[47] Huei-Huang Chiu and S. P. Su. Theory of droplets (ii) : states, structures, and laws of interacting droplets. *Atomization and Sprays*, 7 :1–32, 1997. citée en p. 94

[48] R. Clift, J. R. Grace, and M. E. Weber. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978. citée en p. 83, 91

[49] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinsot. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12 :1843–1863, 2000. citée en p. 75, 206

[50] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for LES. *Journal of Computational Physics*, 162 :338–371, 2000. citée en p. 95

[51] C.T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows With Droplets and Particles*. CRC Press, August 2011. citée en p. 82, 84, 154

[52] B. Cuenot and T. Poinsot. Asymptotic and numerical study of diffusion flames with variable lewis number and finite rate chemistry. *Combustion and Flame*, 104 :111–137, 1996. citée en p. 205

[53] A. Cuoci, M. Mehl, G. Buzzi-Ferraris, T. Faravelli, D. Manca, and E. Ranzi. Autoignition and burning rates of fuel droplets under microgravity. *Combustion and Flame*, 143 :211–226, 2005. citée en p. 31, 32, 35, 169

[54] S. De and S.H. Kim. Large eddy simulation of dilute reacting sprays : Droplet evaporation and scalar mixing. *Combustion and Flame*, 160 :2048–2066, 2013. citée en p. 58, 60

[55] S. De, K.N. Lakshmisha, and Robert W. Bilger. Modeling of nonreacting and reacting turbulent spray jets using a fully stochastic separated flow approach. *Combustion and Flame*, 158 :1992–2008, 2011. citée en p. 58

[56] D. de Oliveira Maionchi and F. Fachini Filho. An exact solution for droplet vaporization with variable transport coefficient. *22nd International Congress of Mechanical Engineering*, pages 9887–9892, 2013. citée en p. 93

[57] O. Delabroy, F. Lacas, B. Labegorre, and J.-M. Samaniego. Paramètres de similitude pour la combustion diphasique. *Rev. Gén. Therm.*, pages 934–953, 1998. citée en p. 45

[58] D.G.Goodwin. *Cantera C++ Users Guide*. http ://sourceforge.net/projects/cantera, 2002. citée en p. 157, 184, 201

[59] L. A. Dombrovsky and S. S. Sazhin. A parabolic temperature profile model for heating of droplets. *ASME Journal of Heat Transfer*, pages 535–537, 2003. citée en p. 92

[60] P. Domingo, L. Vervisch, and J. Réveillon. DNS analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air. *Combustion and Flame*, 140 :172–195, 2005. citée en p. 52

[61] B. Duret, G. Luret, J. Reveillon, T. Menard, A. Berlemont, and F.X. Demoulin. DNS analysis of turbulent mixing in two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 40 :93–105, 2012. citée en p. 49

[62] Harry A. Dwyer and Billy R. Sanders. A detailed study of burning fuel droplets. *Symposium (International) on Combustion*, 21 :633–639, 1988. citée en p. 34

[63] J. K. Eaton and J. R. Fessler. Preferential concentration of particles by turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, 20 :169–209, 1994. citée en p. 26

[64] V. Ebrahimian and C. Habchi. Towards a predictive evaporation model for multi-component hydrocarbon droplets at all pressure conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54 :3552–3565, 2011. citée en p. 94

[65] T. Edwards and L. Q. Maurice. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels. *Journal of Propulsion and Power*, 17 :461–466, 2001. citée en p. 15

[66] Paul Eisenklam, S. A. Arunachalam, and J. A. Weston. Evaporation rates and drag resistance of burning drops. *Symposium (International) on Combustion*, 11 :715–728, 1967. citée en p. 91

[67] S. Elghobashi and G. C. Truesdell. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. I : Turbulence modification. *Physics of Fluids*, 5 :1790–1801, 1993. citée en p. 26

[68] G. M. Faeth and D. R. Olson. The ignition of hydrocarbon fuel droplets in air. SAE technical paper, Society of automotive engineers, 1968. citée en p. 156, 158, 159

[69] T. I. Farouk and F. L. Dryer. Isolated n-heptane droplet combustion in microgravity : a c̈ool flamesẗwo-stage combustion. *Combustion and Flame*, 161 :565–581, 2014. citée en p. 29, 31

[70] P. Fede, P. Février, and O. Simonin. Numerical study of the effect of the fluid turbulence microscales on particle segregation and collision in gas-solid turbulent flows. In *5th International Conference on Multiphase Flow*, Yokohama, Japan, 2004. ICMF. citée en p. 18, 19

[71] P. Fede and O. Simonin. Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles. *Physics of Fluids*, 18, 2006. citée en p. 55

[72] E. Fernández-Tarrazo, A. L. Sánchez, A. Liñán, and F. A. Williams. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 147 :32–38, 2006. citée en p. 182, 183

[73] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé, and T. Poinsot. A two-step chemical scheme for Large-Eddy Simulation of kerosene-air flames. *Combustion and Flame*, 157 :1364–1373, 2010. citée en p. 182

[74] J. A. Friedman and M. Renksizbulut. Investigating a methanol spray flame interacting with an annular air jet using phase-Doppler interferometry and planar laser-induced fluorescence. *Combustion and Flame*, 117 :661–684, 1999. citée en p. 44, 45

[75] A. Fujita, H. Watanabe, R. Kurose, and S. Komori. Two-dimensional direct numerical simulation of spray flames - part 1 : Effects of equivalence ratio, fuel droplet size and radiation, and validity of flamelet model. *Fuel*, 104 :515–525, 2013. citée en p. 53

[76] M Garcia. INP toulouse theses - development and validation of the Euler-Lagrange formulation on a parallel and unstructured solver for large-eddy simulation. http ://ethesis.inp-toulouse.fr/archive/00000715/. citée en p. 61, 99, 101, 102

[77] H.-W. Ge, I. Duwel, H. Kronemayer, R. W. Dibble, E. Gutheil, C. Schulz, and J. Wolfrum. Laser-based experimental and monte carlo PDF numerical investigation of an ethanol/air spray flame. *Combustion Science and Technology*, 180 :1529–1547, 2008. citée en p. 46, 57

[78] H.-W. Ge and Eva Gutheil. Simulation of a turbulent spray flame using coupled PDF gas phase and spray flamelet modeling. *Combustion and Flame*, 153 :173–185, 2008. citée en p. 57

[79] Hai-Wen Ge and Eva Gutheil. Probability density function (PDF) simulation of turbulent spray flows. *Atomization and Sprays*, 16 :531–542, 2006. citée en p. 58

[80] H. Ghassemi, Baek S. W., and Q. S. Khan. Experimental study on evporation of kerosene droplets at elevated pressures and temperatures. *Combustion Science and Technology*, 178 :1669–1684, 2006. citée en p. 94

[81] A. Giauque, L. Selle, T. Poinsot, H. Buechner, P. Kaufmann, and W. Krebs. System identification of a large-scale swirled partially premixed combustor using LES and measurements. *Journal of Turbulence*, 6 :1–20, 2005. citée en p. 61

[82] S.R. Gollahalli and T.A. Brzustowski. Flame characteristics in the wake of a burning methanol drop. *Combustion and Flame*, 24 :273–275, 1975. citée en p. 34

[83] R. A. Gore and C. T. Crowe. Effect of particle size on modulating turbulence intensity. *International Journal of Multiphase Flow*, 15 :279–285, 1989. citée en p. 26

[84] J. D. Gounder, A. Kourmatzis, and A. R. Masri. Turbulent piloted dilute spray flames : Flow fields and droplet dynamics. *Combustion and Flame*, 159 :3372,Äì–3397, 2013. citée en p. 47

[85] J. B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. A new heterogeneous burning velocity formula for the propagation of a laminar flame front through a polydisperse spray of droplet. *Combustion and Flame*, 104 :358–368, 1996. citée en p. 39

[86] E. Gutheil and W. A. Sirignano. Counterflow spray combustion modeling with detailed transport and detailed chemistry. *Combustion and Flame*, 113 :92–105, 1998. citée en p. 43

[87] Eva Gutheil. Issues in computational studies of turbulent spray combustion. In *Experiments and Numerical Simulations of Diluted Spray Turbulent Combustion*, volume 17, pages 1–39. Springer Netherlands, 2011. citée en p. 43, 58

[88] G. Hannebique. *Etude de la structure des flammes diphasiques dans les bruleurs aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2014. citée en p. 61, 99

[89] G. Hannebique, P. Sierra, E. Riber, and B. Cuenot. Large eddy simulation of reactive two-phase flow in a aeronautical multipoint burner. *Flow, Turbulence and Combustion*, 90 :449–469, 2012. citée en p. 93, 95

[90] H. Hara and S. Kumagai. The effect of initial diameter on free droplet combustion with spherical flame. *Symposium (International) on Combustion*, 25 :423–430, 1994. citée en p. 32, 167, 170

[91] A. Haselbacher, F. M. Najjar, and J. P. Ferry. An efficient and robust particle localization algorithm for unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 225 :2198–2213, 2007. citée en p. 102

[92] J. Hayashi, H. Watanabe, R. Kurose, and F. Akamatsu. Effects of fuel droplet size on soot formation in spray flames formed in a laminar counterflow. *Combustion and Flame*, 158 :2559–2568, 2011. citée en p. 43

[93] C. Heye, H. Koo, and V. Raman. Probability density function approach for large eddy simulation of turbulent spray combustion. In *Proceedings of the 7th US Combustion Meeting, Atlanta, US*, 2011. citée en p. 57

[94] C. Heye, V. Raman, and A. R. Masri. LES/probability density function approach for the simulation of an ethanol spray flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34 :1633,Äì–1641, 2012. citée en p. 53, 57

[95] C. Heye, V. Raman, and A. R. Masri. Influence of spray/combustion interactions on auto-ignition of methanol spray flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35 :1639–1648, 2015. citée en p. 57

[96] C. W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39 :201–225, 1981. citée en p. 49

[97] C. Hoefler, S. Braun, R. Koch, and H. Bauer. Modeling spray formation in gas turbines - a new meshless approach. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 135, 2012. citée en p. 49

[98] C. Hollmann and E. Gutheil. Diffusion flames based on a laminar spray flame library. *Combustion Science and Technology*, 135 :175–192, 1998. citée en p. 57

[99] J.S. Huang and H.H. Chiu. Multistate behavior of a droplet in dilute sprays. *Atomization and Sprays*, 7 :479–506, 1997. citée en p. 34

[100] J.S. Huang and H.H. Chiu. Comparison of droplet combustion models in nonpremixed spray combustion. In *38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, 2002. citée en p. 59, 60, 152, 229, 230

[101] J.S. Huang and H.H. Chiu. Canonical reacting fluid dynamics analysis of droplet vaporization and combustion. *Atomization and Sprays*, 18 :471–494, 2008. citée en p. 31

[102] L.W. Huang and C.H. Chen. Droplet ignition in a high-temperature convective environment. *Combustion and Flame*, 109 :145–162, 1997. citée en p. 31

[103] F. Jaegle. *LES of two-phase flow in aero-engines*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, December 2009. citée en p. 61, 99

[104] F. Jaegle, J.-M. Senoner, M. Garcia, F. Bismes, R. Lecourt, B. Cuenot, and T. Poinsot. Lagrangian and eulerian simulations of evaporating fuel spray in an aeronautical multipoint injector. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :2099–2107, 2011. citée en p. 61, 129, 200

[105] P. Jenny, D. Roekaerts, and N. Beishuizen. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38 :846,Äì887, 2012. citée en p. 18, 114

[106] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, and H. Pitsch. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 156 :292–301, 2009. citée en p. 157

[107] T.L. Jiang, W.S. Chen, M.J. Tsai, and H.H. Chiu. A numerical investigation of multiple flame configurations in convective droplet gasification. *Combustion and Flame*, 103 :221–238, 1995. citée en p. 34

[108] W. P. Jones, A. J. Marquis, and D. Noh. LES of a methanol spray flame with a stochastic sub-grid model. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35 :1685–1691, 2015. citée en p. 57

[109] W. P. Jones, A.J. Marquis, and K. Vogiatzaki. Large-eddy simulation of spray combustion in a gas turbine combustor. *Combustion and Flame*, 161 :222–239, 2014. citée en p. 55, 57

[110] W.P. Jones, C. Lettieri, A.J. Marquis, and S. Navarro-Martinez. Large eddy simulation of the two-phase flow in an experimental swirl-stabilized burner. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 38 :145–158, 2012. citée en p. 55

[111] T.L. Kaltz, L.N. Long, M. M. Micci, and J.K. Little. Supercritical vaporization of liquid oxygen droplets using molecular dynamics. *Combustion Science and Technology*, 136 :279–301, 1998. citée en p. 85

[112] A. N. Karpetis and A. Gomez. An experimental study of well-defined turbulent nonpremixed spray flames. *Combustion and Flame*, 121 :1–23, 2000. citée en p. 47

[113] A. Kaufmann, O. Simonin, and T. Poinsot. Direct numerical simulation of particle-laden homogeneous isotropic turbulent flows using a two-fluid model formulation. In 5th *Int. Conf. on Multiphase Flow*. ICMF'04, 2004. citée en p. 39

[114] A. R. Kerstein and C. K. Law. Percolation in combustion sprays I : Transition from cluster combustion to percolate combustion in non-premixed sprays. In *Symposium (International) on Combustion*, pages 961–969, 1982. citée en p. 40, 43, 153, 228

[115] T. Kitano, T. Nakatani, R. Kurose, and S. Komori. Two-dimensional direct numerical simulation of spray flames - part 2 : Effects of ambient pressure and lift, and validity of flamelet model. *Fuel*, 104 :526–535, 2013. citée en p. 53

[116] A. Y. Klimenko and R. W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 25 :595 – 687, 1999. citée en p. 58

[117] A. N. Kolmogorov, I. G. Petrovski, and N. S. Piskunov. *Bjul Moskosvkovo Gos Univ*, 1 :1–72, 1937. citée en p. 66

[118] A. Kourmatzis, W. OĹoughlin, and A. R. Masri. Effects of turbulence, evaporation and heat release on the dispersion of droplets in dilute spray jets and flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 91 :405–427, 2013. citée en p. 47

[119] H. Kronemayer, P. Ifeacho, C. Hecht, T. Dreier, H. Wiggers, and C. Schulz. Gas-temperature imaging in a low-pressure flame reactor for nano-particle synthesis with multi-line NO-LIF thermometry. *Applied Physics B*, 88 :373–377, 2007. citée en p. 45

[120] A. P. Kryukov, V. Yu. Levashov, and S. S. Sazhin. Evaporation of diesel fuel droplets : kinetic versus hydrodynamic models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47 :2541–2549, 2004. citée en p. 85

[121] K. K. Kuo. *Principles of combustion*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2nd edition, 2005. citée en p. 32, 85, 160, 161, 162

[122] R. Kurose, O. Desjardins, M. Nakamura, F. Akamatsu, and H. Pitsch. Numerical simulations of spray flames. In *Annual Research Briefs*, pages 269–280. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2004. citée en p. 43

[123] C. K. Law. Asymptotic theory for ignition and extinction in droplet burning. *Combustion and Flame*, 24 :89–98, 1975. citée en p. 30, 35, 169, 170

[124] C. K. Law, S. H. Chung, and N. Srinivasan. Gas-phase quasi-steadiness and fuel vapor accumulation effects in droplet burning. *Combustion and Flame*, 38 :173–198, 1980. citée en p. 31, 32, 155, 165, 168, 169

[125] A. H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. Taylor & Francis, 1989. citée en p. 109

[126] A. H. Lefebvre. *Gas Turbines Combustion*. Taylor & Francis, 1999. citée en p. 15, 17

[127] F. Lemoine and G. Castanet. Temperature and chemical composition of droplets by optical measurement techniques : a state-of-the-art review. *Experiments in Fluids*, 54 :1–34, 2013. citée en p. 94

[128] S. Lerman and J. Barry Greenberg. Spray diffusion flame - an asymptotic theory. *Atomization and Sprays*, 20 :1047–1064, 2010. citée en p. 43

[129] C. Letty, B. Renou, J. Reveillon, S. Saengkaew, and G. Grehan. Experimental study of droplet temperature in a two-phase heptane/air v-flame. *Combustion and Flame*, 160 :1803–1811, 2013. citée en p. 45

[130] A. Linan. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronautica*, 1 :1007, 1974. citée en p. 169, 204

[131] F. Liu, M. Yang, G.J. Smallwood, and H. Zhang. Evaluation of the SNB based full-spectrum CK method for thermal radiation calculations in $CO_2 - H_2O$ mixtures. In *Proceedings of ICHMT, RAD04, Istanbul, Turkey*, 2004. citée en p. 35

[132] Y. Liu, J. Li, Y. Gao, and X.M. Yuan. Laser diagnostic investigation on the spray and combustion with Butanol-Biodiesel-Diesel fuel blends. *Advanced Materials Research*, 443-444 :986–995, 2012. citée en p. 29, 32, 166, 167, 168

[133] J. C. Livengood and P. C. Wu. Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 5, pages 347–356. Elsevier, 1955. citée en p. 156

[134] T. Lu and C.K. Law. Strategies for mechanism reduction for large hydrocarbons : n-heptane. *Combustion and Flame*, 154 :153–163, 2008. citée en p. 181

[135] K. Luo, H. Pitsch, M. G. Pai, and O. Desjardins. Direct numerical simulations and analysis of three-dimensional n-heptane spray flames in a model swirl combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :2143–2152, 2011. citée en p. 53, 54

[136] Anthony J. Marchese, Timothy L. Vaughn, Kenneth Kroenlein, and Frederick L. Dryer. Ignition delay of fatty acid methyl ester fuel droplets : Microgravity experiments and detailed numerical modeling. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :2021–2030, 2011. citée en p. 29

[137] T. Marchione, S.F. Ahmed, and E. Mastorakos. Ignition of turbulent swirling n-heptane spray flames using single and multiple sparks. *Combustion and Flame*, 156 :166–180, 2009. citée en p. 48

[138] S.K. Marley, K.M. Lyons, and K.A. Watson. Leading-Edge reaction zones in Lifted-Jet gas and spray flames. *Flow, Turbulence and Combustion formerly 'Applied Scientific Research'*, 72 :29–47, 2004. citée en p. 46

[139] S.K. Marley, E.J. Welle, K.M. Lyons, and W.L. Roberts. Effects of leading edge entrainment on the double flame structure in lifted ethanol spray flames. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 29 :23–31, 2004. citée en p. 46, 47, 51

[140] M. Massot, M. Kumar, M.D. Smooke, and A. Gomez. Spray counterflow diffusion flames of heptane : Experiments and computations with detailed kinetics and transport. *Symposium (International) on Combustion*, 27 :1975–1983, 1998. citée en p. 43

[141] J. D. Mattingly. *Elements of gas turbine propulsion*. AIAA, 2nd edition, 2005. citée en p. 13

[142] X. Mercier, M. Orain, and F. Grisch. Investigation of droplet combustion in strained counterflow diffusion flames using planar laser-induced fluorescence. *Journal of Physics A : Chemistry*, 88 :151–160, 2007. citée en p. 31, 41, 43, 226

[143] M. Mikami, S. Miyamoto, and N. Kojima. Counterflow diffusion flame with polydisperse sprays. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :593–599, 2002. citée en p. 31, 38, 41, 43, 110, 111, 179, 180, 181, 185, 186, 187

[144] M. Mikami, Y. Mizuta, Y. Tsuchida, and N. Kojima. Flame structure and stabilization of lean-premixed sprays in a counterflow with low-volatility fuel. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :2223–2230, 2009. citée en p. 38, 43

[145] M. Mikami, H. Oyagi, N. Kojima, Y. Wakashima, M. Kikuchi, and S. Yoda. Microgravity experiments on flame spread along fuel-droplet arrays at high temperatures. *Combustion and Flame*, 146 :391–406, 2006. citée en p. 29, 39

[146] R.S. Miller, K. Harstad, and J. Bellan. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *International Journal of Multiphase Flow*, 24 :1025–1055, 1998. citée en p. 92, 93

[147] F. Moreau and R. Bazile. Evaporation of bi-component droplets in a heated, highly turbulent flow. *Experiments in Fluids*, pages 1–12. citée en p. 94

[148] M. Mortensen and R.W. Bilger. Derivation of the conditional moment closure equations for spray combustion. *Combustion and Flame*, 156 :62–72, 2009. citée en p. 58

[149] M. Nakamura, F. Akamatsu, R. Kurose, and M. Katsuki. Combustion mechanism of liquid fuel spray in a gaseous flame. *Physics of Fluids*, 17 :123301, 2005. citée en p. 43

[150] S. Navarro-Martinez, A. Kronenburg, and F. Mare. Conditional Moment Closure for Large Eddy Simulations. *Flow, Turbulence and Combustion*, 75 :245–274, 2005. citée en p. 58

[151] V. Nayagam. Activation energy asymptotics for methanol droplet extinction in microgravity. *Combustion and Flame*, 160 :2638–2640, 2013. citée en p. 35, 169

[152] V. Nayagam, D. L. Dietrich, P. V. Ferkul, M. C. Hicks, and F. A. Williams. Can cool flames support quasi-steady alkane droplet burning ? *Combustion and Flame*, 159 :3583–3588, 2012. citée en p. 29, 31

[153] A. Neophytou and E. Mastorakos. Simulations of laminar flame propagation in droplet mists. *Combustion and Flame*, 156 :1627–1640, 2009. citée en p. 39, 40

[154] A. Neophytou, E. Mastorakos, and R.S. Cant. DNS of spark ignition and edge flame propagation in turbulent droplet-laden mixing layers. *Combustion and Flame*, 157 :1071–1086, 2010. citée en p. 53

[155] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62 :183–200, 1999. citée en p. 73, 200

[156] T. Niioka, S. Hasegawa, T. Tsukamoto, and J. Sato. Diffusion-flame extinction of liquid fuel at elevated pressures. *Combustion and Flame*, 86 :171–178, 1991. citée en p. 36

[157] C. W. Oseen. *Hydrodynamik*. Leipzig, 1927. citée en p. 82, 83

[158] S. Osher and R. P. Fedkiw. Level set methods : An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169 :463–502, 2001. citée en p. 49

[159] C. Pichard, Y. Michou, C. Chauveau, and I. Gokalp. Average droplet vaporization rates in partially prevaporized turbulent spray flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :527–533, 2002. citée en p. 47

[160] C. Poelma, J. Westerweel, and G. Ooms. Particle-fluid interactions in grid-generated turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 589 :315–351, 2007. citée en p. 25

[161] T. Poinsot and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, vol.101 :104–129, 1992. citée en p. 94, 200

[162] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Third Edition (www.cerfacs.fr/elearning), 2011. citée en p. 6, 23, 33, 39, 40, 59, 72, 202, 205, 218

[163] Daniel N. Pope and George Gogos. Numerical simulation of fuel droplet extinction due to forced convection. *Combustion and Flame*, 142 :89–106, 2005. citée en p. 35, 36, 169, 170, 171

[164] S. B. Pope. Pdf methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 19 :119–192, 1985. citée en p. 56, 57

[165] J. Pozorski and S. V. Apte. Filtered particle tracking in isotropic turbulence and stochastic modeling of subgrid-scale dispersion. *International Journal of Multiphase Flow*, 35 :118–128, 2009. citée en p. 55

[166] C. Presser. Benchmark experimental database for multiphase combustion model input and validation : A users Follow-Up. 2007. citée en p. 48

[167] V. Raghavan, V. Babu, T. Sundararajan, and R. Natarajan. Flame shapes and burning rates of spherical fuel particles in a mixed convective environment. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48 :5354–5370, 2005. citée en p. 32

[168] R. H. Rangel and W. A. Sirignano. An evaluation of the point-source approximation in spray calculation. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 16 :37–57, 1989. citée en p. 78, 114, 115, 151

[169] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.*, 48 :173, 1952. citée en p. 90, 165

[170] J. Reveillon. Direct numerical simulation of sprays : Turbulent dispersion, evaporation and combustion. In Daniele L. Marchisio and Rodney O. Fox, editors, *Multiphase Reacting Flows : Modelling and Simulation*, volume 492, pages 229–269. Springer Vienna, Vienna. citée en p. 40, 181, 182

[171] J. Reveillon and F.X. Demoulin. Evaporating droplets in turbulent reacting flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :2319–2326, 2007. citée en p. 53

[172] J. Réveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347, 2005. citée en p. 50, 51, 52

[173] O. Reynolds. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Phil. Trans. R. Soc. London A*, 186 :123–164, 1895. citée en p. 71

[174] L. F. Richardson. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, cambridge edition, 1922. citée en p. 66

[175] J. Rocchi. Modéle de combustion turbulente non-prémélangée en les. In *CRCT - communication*, 2013. citée en p. 205, 206

[176] M. Sanjosé, T. Lederlin, L. Gicquel, B. Cuenot, H. Pitsch, N. García-Rosa, R. Lecourt, and T. Poinsot. LES of two-phase reacting flows. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 251–263. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2008. citée en p. 48

[177] S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :162–214, 2006. citée en p. 91, 92

[178] S. S. Sazhin, A. E. Elwardany, and M. R. Heikal. New approaches to the modelling of multi-component fuel droplet heating and evaporation. *6th International Workshop on Multi-Rate Processes and Hysteresis*, 2012. citée en p. 94

[179] L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung*, 77 :318–320, 1935. citée en p. 83, 95

[180] R. Seiser, H. Pitsch, K. Seshadri, W.J. Pitz, and H.J. Gurran. Extinction and autoignition of n-heptane in counterflow configuration. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2) :2029–2037, 2000. citée en p. 219

[181] A. Sengissen, J. F. Van Kampen, R. Huls, G. Stoffels, J. B. W. Kok, and T. Poinsot. Les and experimental studies of cold and reacting flows in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combustion and Flame*, 150 :40–53, 2007. citée en p. 61

[182] J.-M. Senoner. *Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans un bruleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange*. PhD thesis, INP Toulouse, 2010. citée en p. 59, 61, 147

[183] J. Seo and K. Y. Huh. Analysis of combustion regimes and conditional statistics of autoigniting turbulent n-heptane sprays. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :2127–2134, 2011. citée en p. 53

[184] J. Seo and K. Y. Huh. Lagrangian conditional statistics of turbulent n-heptane spray combustion in different injection conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34 :1687,Äì1695, 2012. citée en p. 53

[185] B. Shotorban and F. Mashayek. Modeling subgrid-scale effects on particles by approximate deconvolution. *Physics of Fluids*, 17 :081701, 2005. citée en p. 56

[186] P. Sierra. *Modeling the dispersion and evaporation of sprays in aeronautical combustion chambers*. PhD thesis, INP Toulouse, 2012. citée en p. 61, 162

[187] O. Simonin, P. Février, and Jérome Laviéville. On the spatial distribution of heavy-particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos. *Journal of Turbulence*, 3 :40, 2002. citée en p. 78

[188] W. A. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999. citée en p. 32, 78, 85, 92, 113, 114, 115, 160

[189] W. A. Sirignano. Liquid-fuel burning with nonunitary lewis number. *Combustion and Flame*, 148 :177–186, 2007. citée en p. 93

[190] William A. Sirignano. Advances in droplet array combustion theory and modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 42 :54–86, June 2014. citée en p. 36

[191] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91 :99–164, 1963. citée en p. 73

[192] A.J. Smallbone, W. Liu, C.K. Law, X.Q. You, and H. Wang. Experimental and modeling study of laminar flame speed and non-premixed counterflow ignition of n-heptane. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :1245–1252, 2009. citée en p. 181, 184, 201

[193] D. B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 847–864. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1953. citée en p. 85

[194] D. B. Spalding. Experiments on the burning and extinction of liquid fuel spheres. *Fuel*, 32 :169–185, 1953. citée en p. 32

[195] K. D. Squires and J. K. Eaton. Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Physics of FluidsA*, 2(7) :1191–1203, 1990. citée en p. 26

[196] G. Staffelbach, L. Y. M. Gicquel, and T. Poinsot. *Highly Parallel Large Eddy Simulations of Multiburner Configurations in Industrial Gas Turbines*, volume Complex Effects in LES, pages 325–336. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 2007. citée en p. 61

[197] R. Stauch, S. Lipp, and U. Maas. Detailed numerical simulations of the autoignition of single n-heptane droplets in air. *Combustion and Flame*, 145 :533–542, 2006. citée en p. 31, 158, 160

[198] R. Stauch and U. Maas. The auto-ignition of single n-heptane/iso-octane droplets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50 :3047–3053, 2007. citée en p. 31, 158, 160

[199] W. Sutherland. The viscosity of gases and molecular force. *Philosophical Magazine*, 5 :507–531, 1893. citée en p. 69

[200] T. Suzuki and H. Chiu. Multi droplet combustion on liquid propellants. In *Proceedings of the Ninth International Symposium on Space and Technology and Science*, pages 145–154, 1971. citée en p. 40

[201] T. Takeno, M. Murayama, and Y. Tanida. Fractal analysis of turbulent premixed flame surface. *Experiments in Fluids*, 10 :61–70, 1990. citée en p. 7, 218

[202] D. Thevenin, P. H. Renard, G. Fiechtner, J. Gord, and J. C. Rolon. Regimes of nonpremixed flame/vortex interaction. In *28th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 2101–2108. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000. citée en p. 205

[203] S. Tonini and Gi. E. Cossali. A novel vaporisation model for a single-component drop in high temperature air streams. *International Journal of Thermal Sciences*, 75 :194–203, 2014. citée en p. 93

[204] D. Tyliszczak, A. Cavaliere and E. Mastorakos. LES/CMC of blow-off in a liquid fueled swirl burner. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2013. citée en p. 5, 58, 197, 198, 208, 209, 210, 214, 215

[205] Markus Uhlmann. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209 :448–476, 2005. citée en p. 49

[206] S. Ulzama and E. Specht. An analytical study of droplet combustion under microgravity : Quasi-steady transient approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :2301–2308, 2007. citée en p. 31, 32

[207] A. Umemura. Spray group combustion. In Nasser Ashgriz, editor, *Handbook of Atomization and Sprays*, pages 299–313. Springer US, Boston, MA, 2011. citée en p. 36, 39, 43, 153

[208] A. Umemura and S. Takamori. Percolation theory for flame propagation in non- or less-volatile fuel spray : A conceptual analysis to group combustion excitation mechanism. *Combustion and Flame*, 141 :336–349, 2005. citée en p. 36, 37, 43, 228

[209] J. Urzay. A revised spray-combustion diagram of diffusion-controlled burning regimes in fuel-spray clouds. *Annual Research Briefs of the Center for Turbulence Research*, pages 193–198, 2011. citée en p. 42

[210] J. Urzay, H. Pitsch, and A. Linan. Source terms for calculations of vaporizing and burning fuel sprays with non-unity lewis numbers in gases with temperature-dependent thermal conductivities. citée en p. 93

[211] L. Valino. A Field Monte Carlo Formulation for Calculating the Probability Density Function of a Single Scalar in a Turbulent Flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, 60 :157–172, 1998. citée en p. 57

[212] T. Veronika. Non-equilibrium diffusion combustion of a fuel droplet. *Acta Astronautica*, 75 :78–84, 2012. citée en p. 92

[213] B. Vieille, C. Chauveau, X. Chesneau, A. Odeode, and I. Gokalp. High-pressure droplet burning experiments in microgravity. *Symposium International on Combustion*, 26 :1259–1265, 1996. citée en p. 32

[214] F. Wang, B. Hu, and Y. Huang. A two-phase turbulent combustion model and its validation for spray flames. *Fuel*, 113 :280–286, 2013. citée en p. 60, 152

[215] L-P Wang and M. R. Maxey. Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 256 :27–68, 1993. citée en p. 26

[216] H. Watanabe, R. Kurose, S. M. Hwang, and F. Akamatsu. Characteristics of flamelets in spray flames formed in a laminar counterflow. *Combustion and Flame*, 148 :234–248, 2007. citée en p. 43

[217] H. Watanabe, R. Kurose, S. Komori, and H. Pitsch. Effects of radiation on spray flame characteristics and soot formation. *Combustion and Flame*, 152 :2–13, 2008. citée en p. 43

[218] J. F. Widmann and C. Presser. A benchmark experimental database for multiphase combustion model input and validation. *Combustion and Flame*, 129 :47–86, 2002. citée en p. 48

[219] C. R. Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 18 :517–519, 1950. citée en p. 93

[220] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. citée en p. 75

[221] A. M. Wood, W. Hwang, and J. K. Eaton. Preferential concentration of particles in homogeneous and isotropic turbulence. *International journal of multiphase flow*, 31 :1220–1230, 2005. citée en p. 26

[222] G. Wu and W. A. Sirignano. Transient burning of a convective fuel droplet. *Combustion and Flame*, 157 :970–981, 2010. citée en p. 35

[223] G. Wu, W. A. Sirignano, and F. A. Williams. Simulation of transient convective burning of an n-octane droplet using a four-step reduced mechanism. *Combustion and Flame*, 158(6) :1171–1180, June 2011. citée en p. 35

[224] X. Wu, C. K. Law, and A. C. Fernandez-Pello. A unified criterion for the convective extinction of fuel particles. *Combustion and Flame*, 44 :113–124, 1982. citée en p. 35, 36, 169, 170

[225] X. Wu and P. Moin. Transitional and turbulent boundary layer with heat transfer. *Physics of Fluids*, 22 :085105, 2010. citée en p. 36, 170

[226] G. Xu, M. Ikegami, S. Honma, K. Ikeda, X. Ma, H. Nagaishi, D. L. Dietrich, and P. M. Struk. Inverse influence of initial diameter on droplet burning rate in cold and hot ambiences : a thermal action of flame in balance with heat loss. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46 :1155–1169, 2003. citée en p. 32, 165, 166, 176, 177

[227] J. R. Yang and S. C. Wong. On the suppression of negative temperature coefficient (NTC) in autoignition of n-heptane droplets. *Combustion and Flame*, 132 :475–491, 2003. citée en p. 30, 159

[228] M.R.G. Zoby, S. Navarro-Martinez, A. Kronenburg, and A.J. Marquis. Evaporation rates of droplet arrays in turbulent reacting flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :2117–2125, 2011. citée en p. 49

[229] M.R.G. Zoby, S. Navarro-Martinez, A. Kronenburg, and A.J. Marquis. Turbulent mixing in three-dimensional droplet arrays. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 32(3) :499–509, June 2011. citée en p. 49