



Simulation Numérique Directe de la combustion turbulente diphasique: Application à l'étude de la propagation et de la structure des flammes

Karine Cannevière

► To cite this version:

Karine Cannevière. Simulation Numérique Directe de la combustion turbulente diphasique: Application à l'étude de la propagation et de la structure des flammes. Modélisation et simulation. INSA de Rouen, 2003. Français. NNT: . tel-00006820

HAL Id: tel-00006820

<https://theses.hal.science/tel-00006820>

Submitted on 6 Sep 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE
présentée
A L'INSA DE ROUEN

Pour l'obtention du grade de

Docteur

Discipline : Energétique
Spécialité : Mécanique des fluides

par

Karine CANNEVIERE

**Simulation Numérique Directe
de la combustion turbulente diphasique:
Application à l'étude de la propagation et de la
structure des flammes**

soutenue le 18 décembre 2003

Composition du jury

B. Cuenot
M. Massot
J.C. Sautet
L. Vervisch
J. Réveillon

Chercheur, CERFACS, Toulouse.
Chargé de Recherche, CNRS, Université Claude Bernard, Lyon 1.
Professeur, Université de Rouen
Professeur, INSA de Rouen.
Maître de conférences, Université de Rouen.

Je tiens tout d'abord à remercier Michel Ledoux, directeur du CORIA-UMR6614-CNRS, pour m'avoir accueillie au sein du laboratoire durant ma thèse, ainsi que Luc Vervisch, Professeur à l'INSA de Rouen, pour avoir accepté de diriger cette thèse.

Je remercie également Julien Réveillon, maître de conférence à l'Université de Rouen, de la confiance qu'il m'a témoignée en encadrant ma thèse. J'ai beaucoup apprécié les conseils et l'aide qu'il m'a apporté durant ces quatre années, entre mon arrivée en tant que stagiaire et mon départ en tant que docteur, du laboratoire.

Mes remerciements vont également à tous les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à ma thèse, à savoir : Bénédicte Cuenot, Chercheur au CERFACS à Toulouse et Marc Massot, Chargé de Recherche CNRS à l'Université Claude Bernard Lyon 1 qui ont accepté d'être rapporteurs de ma thèse et Jean-Charles Sautet, Professeur à l'Université de Rouen, qui a présidé ce jury.

Je souhaite également remercier toutes les personnes du laboratoire qui ont fait de ces quatre années un lieu chaleureux où il fut agréable de travailler, et plus particulièrement Christelle, Cécile, Raphaël, Jérôme et Matthieu.

Enfin, je tiens à exprimer toute mon affection à mes parents, et surtout à Nicolas pour m'avoir soutenu et encouragé.

Simulation Numérique Directe de la combustion turbulente diphasique: Application à l'étude de la propagation et de la structure des flammes

Ce travail est consacré à l'étude de la propagation et de la structure des flammes dans le cas des écoulements turbulents diphasiques. Pour cela, un code de simulation numérique directe (DNS) est utilisé. Les équations et le modèle chimique employés dans le code de DNS sont tout d'abord présentés. Ensuite, une étude des flammes diphasiques laminares est réalisée. Dans un premier temps, une étude analytique portant sur la dynamique d'évaporation des gouttes est proposée. L'influence importante sur le mode de combustion du rapport entre le temps de préchauffage de la goutte et le temps d'évaporation, est mise en évidence. La simulation de la propagation d'une flamme au sein d'un nuage de gouttes est réalisée et un comportement de flamme pulsée est abordée. Une étude de ces flammes en fonction de la topologie du combustible liquide nous a permis de montrer qu'elles avaient une structure de flamme double composée d'une flamme de prémélange suivie d'une flamme de diffusion. L'étude des flammes turbulentes diphasiques fait l'objet de notre dernière étude. Des DNS de l'injection de sprays monodisperses sont effectuées en variant les paramètres d'injection de la phase liquide (densité, rapport d'équivalence). La base de données obtenue nous permet de décrire les régimes de flamme locaux et globaux apparaissant dans la combustion de sprays, et qui sont répertoriés en quatre familles principales : régime externe ouvert et fermé, combustion de groupe et combustion mixte. Enfin, un diagramme de combustion est développé, impliquant le temps d'évaporation des gouttes, la distance inter-gouttes ou inter-groupes de gouttes, et enfin le rapport d'équivalence injecté.

Direct Numerical Simulation of two-phases turbulent combustion: Application to study of propagation and structure of flames

This work is devoted to the study of the propagation and the structure of two-phases turbulent flames. To this end, Direct Numerical Simulations (DNS) are used. First, numerical systems for two-phases flow simulations is presented along with a specific chemical model. Then, a study of laminar spray flames is carried out. An analytical study related to the dynamics of evaporation of droplets is first proposed where the influence on the equivalence ratio of the ratio between the heating delay of the droplet and the evaporation delay is detailed. The simulation of a propagating flame through a cloud of droplets is carried out and a pulsating behavior is highlighted. A study of these flames according to the topology of liquid fuel enabled us to characterize a double flame structure composed of a premixed flame and a diffusion flame. Our last study is devoted to spray turbulent flames. Two-phase combustion of turbulent jets has been simulated. By varying the spray injection parameters (density, equivalence ratio), a database has been generated. This database allowed us to describe local and global flame regimes appearing in the combustion of sprays. They have been categorized in four main structures : open and closed external regime, group combustion and mixed combustion. Eventually, a combustion diagram has been developed. It involves the spray vaporization time, the mean inter-space between droplets or group of droplets and eventually the injected equivalence ratio.

Table des matières

Nomenclature	11
Introduction	15
1 Equations de la DNS diphasique	21
1.1 Phase dispersée	25
1.1.1 Evolution de la surface	26
1.1.2 Evolution de la température	35
1.1.3 Equation du mouvement	36
1.1.4 Approche Lagrangienne pour les gouttes	38
1.2 Phase porteuse	38
1.2.1 Equations pour le gaz	39
1.2.2 Termes sources chimiques	41
1.3 Couplage Eulérien/Lagrangien	41
1.4 Schémas et conditions limites	43
1.5 Conclusion	44
2 Chimie	45
2.1 Modèles de base	47
2.2 Espace des phases et Loi d'Arrhenius	47
2.2.1 Définitions	48
2.2.2 Loi d'Arrhenius	50
2.3 Méthode GKAS	52
2.3.1 Remapping	53
2.3.2 Scaling	55
2.3.3 Processus d'allumage et d'extinction	57
2.4 Influence de la courbe en cloche	59
2.5 Conclusion	61
3 Flammes diphasiques laminares	71
3.1 Introduction du problème	71

3.2	Définitions	72
3.2.1	Richesse du mélange	72
3.2.2	Richesse gazeuse issue de l'évaporation	74
3.3	Modèle analytique du problème	76
3.3.1	Surface initiale et température des gaz	76
3.3.2	Evolution de la fraction massique de vapeur	77
3.3.3	Modèle pour l'évaporation de la goutte	79
3.3.4	Paramètres et résultats	80
3.3.5	Conclusion	83
3.4	Flammes diphasiques monodimensionnelles	87
3.4.1	Configuration et allumage	89
3.4.2	Mise en régime	91
3.4.3	Résultats	92
3.4.4	Caractéristiques des flammes	93
3.4.5	Comportement et structure des flammes pulsées	94
3.4.6	Conclusion	103
4	Flammes sprays turbulentes	115
4.1	Introduction	115
4.2	Configurations de calculs	119
4.2.1	Vitesse d'injection et profils de température	121
4.2.2	Propriétés du spray variant	123
4.3	Flammes sprays laminaires	125
4.4	Flammes sprays dans un jet fluctuant	134
4.4.1	Paramètres de référence	134
4.4.2	Régimes de combustion et dégagement de chaleur	135
4.4.3	Etude des structures de flamme	140
4.4.4	Diagramme de combustion	142
4.5	Conclusion	146
	Conclusion	157
A	Méthodes numériques pour la génération de champs DNS avec des statistiques imposées : vitesse turbulente, scalaires fluctuants et sprays à densité variable	161
A.1	Introduction	161
A.2	Champ de vitesse turbulent	163
A.2.1	Répartition de l'énergie dans l'espace spectral	163
A.2.2	Discretisation de l'espace spectral	164
A.2.3	Orientation des vecteurs vitesses	165
A.2.4	Retour sur l'espace physique	167
A.3	Génération de champs scalaires turbulents	167

A.4	Description d'un spray Lagrangien dispersé	170
A.5	Appendice - Nomenclature	172
A.6	Appendice - Spectre d'énergie analytique	172
A.6.1	Spectre de Passot-Pouquet	172
A.6.2	Spectre de Pope	173
A.7	Appendice - Construction de la PDF analytique	174
B	Visualisation de l'effet de particules dispersées sur le transfert de chaleur d'un jet impactant	183
B.1	Résumé	183
B.2	Introduction	184
B.3	Configurations de calcul	185
B.4	Outils numériques	187
B.5	Résultats et discussion	189
B.5.1	Simulation de référence	189
B.5.2	Développement des structures	190
B.5.3	Flux de chaleur	192
B.6	Conclusion	199

Nomenclature

Symbole	Signification
Caractères latins	
a_k	Diamètre de la goutte k
b	Paramètre de Spalding
B_k	Nombre de Spalding massique
B_T	Nombre de Spalding thermique
BY	Nombre de Spalding
c	Variable de progrès
C_p	Chaleur spécifique à pression contante
C_{pd}	Chaleur spécifique de la goutte
C_D	Coefficient de trainée
D^*	Coefficient de diffusion
D_v	Nombre adimensionnel : $D_v = \tau_v / \tau_f$
d	Densité du spray
G	Nombre de combustion de groupe
h_c	Coefficient d'échange par convection
l	Echelle de longueur liée à la production d'énergie
L_v	Chaleur latente de vaporisation
L_e	Nombre de Lewis
L_1	Longueur du domaine
(L_x, L_y)	Dimensions du domaine pour les simulations de flammes turbulentes
m_i	Masse
$\dot{m}_F$	Flux massique de combustible liquide au sein de l'injecteur
$\dot{m}_O^I$	Flux massique de conburant au sein de l'injecteur
$\dot{m}_O^B$	Flux massique total d'oxydant injecté dans la chambre
n	Nombre de gouttes
n_i	Exposant de l'espèce i de la réaction
Nu_c	Nombre de Nusselt convectif
N	Nombre de points du maillage
(N_x, N_y)	Maillage Cartésien régulier
P	Pression
Pr	Nombre de Prandtl
p	Coefficient de présence
q_0	Energie libérée par unité de masse de combustible

Caractères latins	
r_s	rayon de la goutte
r	Coordonnée polaire
Re	Nombre de Reynolds
Re_k	Nombre de Reynolds lié à la goutte
Re_t	Nombre de Reynolds turbulent
R_{uF}	Constante des gaz parfaits liée au combustible
s	Coefficient stoechiométrique
s_0	Surface initiale de la goutte
Sc	Nombre de Schmidt
Sh_c	Nombre de Sherwood convectif
St	Nombre de Strouhal
So	Nombre de Stokes
S_l	Vitesse de flamme
S	Paramètre de séparation des gouttes
T	Température
T_a	Température d'activation
t	Temps
T_c	Température de préchauffage
TRM	Taux de réaction maximum de la flamme spray
u_f	Vitesse de la flamme gazeuse de référence
U_i	Vitesse de l'écoulement, $i = 1, 2, 3$
U_r	Vitesse radiale de l'écoulement
U	Vitesse du gaz
$\mathcal{V}$	Volume de la maille
V_k	Vitesse de la goutte k
V_f	Vitesse de la flamme spray
$V_g(\Phi_L)$	Vitesse de la flamme gazeuse de richesse Φ_L
$\dot{w}$	Termes sources chimiques
W_v	Taux d'évaporation
W_i	Masse moléculaire de l'espèce i
W_{ref}	Taux de réaction de la flamme gazeuse de référence
W_{emax}	Taux de réaction maximum
x_i	Coordonnées spatiales, $i = 1, 2, 3$
(x, y, z)	Coordonnées cartésiennes
X_F	Fraction molaire de combustible
Y_i	Fraction massique de l'espèce i
Y_k^s	Fraction massique de combustible gazeux à la surface de la goutte
Z	Fraction de mélange

Symbole	Signification
Caractères grecques	
α	Chaleur de réaction réduite
β	Nombre de Zeldowitch $\beta = \alpha T_a / T / b$
β_k	Temps de relaxation de la goutte a
χ	Taux de dissipation scalaire
δ_Y	Epaisseur de couche limite de diffusion des espèces
δ_T	Epaisseur de couche limite de température
δ_f	Epaisseur de la flamme gazeuse de référence
δ_s	Distance inter- goutte moyen
δ_{rf}	Rayon caractéristique de la flamme de diffusion
δ_0	Longueur caractéristique
δ_{ij}	Symbole de Krönecker
$\dot{\varepsilon}_F$	Masse de combustible gazeux éjecté du volume $\mathcal{V}$
$\dot{\varepsilon}_O$	Masse d'oxydant gazeux éjecté du volume $\mathcal{V}$
Φ_s	Rapport d'équivalence de la réaction constant
Φ	Rapport d'équivalence de la réaction
Φ_{L0}^I	Richesse globale liquide de l'injecteur
Φ_{L0}^B	Richesse globale du brûleur
Φ_L	Richesse locale liquide
Φ_G	Richesse gazeuse locale
Φ_{L0}	Richesse liquide initiale
η	Echelle de Kolmogorov
φ	Variable de Schwab-Zeldowitch
λ	Conductivité thermique
μ	Viscosité dynamique
ν	Viscosité cinématique
ν_i	Coefficient stoechiométrique de l'espèce i dans la réaction chimique
ρ	Masse volumique du gaz
ρ_d	Masse volumique du combustible liquide
τ_v	Temps d'évaporation de la goutte
τ_f	Temps caractéristique de la flamme gazeuse de référence
τ_p	Temps cinétique des gouttes
τ_k	Temps de retournement d'un tourbillon de la turbulence forcée
τ_J	Temps caractéristique de l'injection du jet
ξ_p	Paramètre normalisé donnant le pourcentage du taux de réaction provenant de la combustion en régime prémélangé
ζ^*	Facteur de pente

Symbole	Signification
Indices	
k	indice de la goutte
ref	Etat de référence
0	Etat initial
d	Relatif à la goutte
u	Gaz frais
b	Gaz brûlés
*	Adimensionné
.	Terme source
M	Variables mappées

Introduction Générale

Les systèmes industriels impliquant des phénomènes de combustion (fours, moteurs automobiles, aéronautiques, turbines à gaz...) sont soumis à des contraintes de plus en plus importantes, tant sur le plan économique (réduction des coûts, amélioration des performances,...) que sur le plan environnemental (réduction des émissions de polluants, des émissions sonores, ...). L'ensemble de ces considérations motivent de nombreux travaux de recherche liés à la combustion turbulente. En effet, la compréhension, la modélisation et éventuellement le contrôle des phénomènes physiques interagissant au sein d'une chambre de combustion permettent non seulement l'amélioration des systèmes actuels mais aussi le développement de nouvelles technologies.

Dans la majeure partie des cas, ces systèmes sont basés sur la combustion turbulente d'un carburant qui est stocké sous forme liquide puis injecté soit dans une chambre de prévaporisation, soit directement dans la chambre de combustion (planche P0.1.). Le combustible liquide est alors dispersé sous la forme d'un nuage de gouttelettes (ou spray) tout en s'évaporant. En fonction des systèmes concernés, la combustion aura lieu soit au milieu du spray soit ultérieurement, au sein de la vapeur de combustible. En fonction des caractéristiques de l'injection (distribution en taille des gouttes, nature du combustible, ...) puis de celles de la dispersion des gouttes et du mélange de la vapeur du fait de l'environnement turbulent, les propriétés cruciales des phénomènes de combustion (régimes, stabilité, longueur de flamme, hauteur d'accrochage, ...) peuvent être très différentes.

Afin d'améliorer le rendement écologique et économique de tels systèmes, il est crucial de comprendre et de contrôler l'ensemble des processus physiques se déroulant depuis l'injection du liquide dans la chambre jusqu'aux phénomènes de combustion. Le schéma présenté figure 1

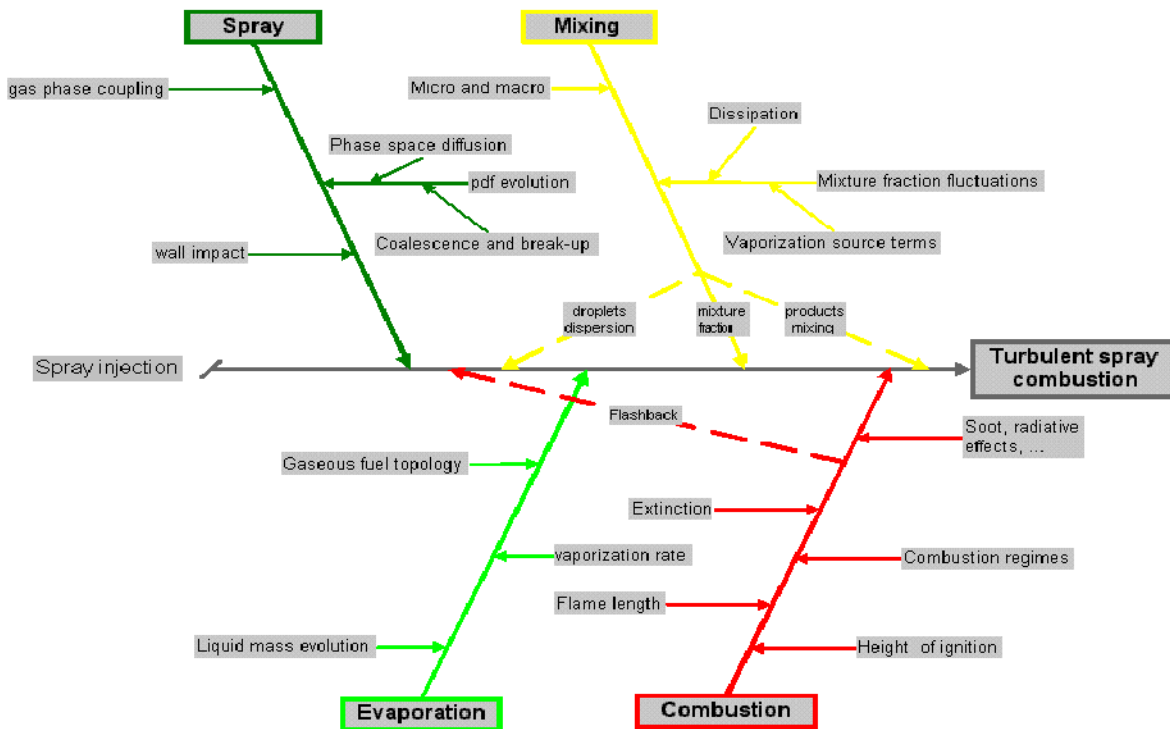


FIG. 1 – Schéma représentant les étapes d'injection, de dispersion, d'évaporation et de combustion d'un spray dans une chambre de combustion.

résume la majeure partie des phénomènes en présence, grâce à quatre intitulés principaux :

Spray : Afin de simplifier le diagramme, la phase de pulvérisation du liquide n'est pas abordée en détail. Dans un premier temps, il s'agit donc d'être à même de caractériser les propriétés du spray à la fois au niveau de l'injection (distribution de la taille, de la vitesse, de la température du liquide) mais aussi au sein de l'écoulement (interaction gouttes/parois, gouttes/gouttes, etc). De plus, la taille des gouttes variant au cours de leur existence, leur dynamique au sein de l'écoulement peut varier fortement.

Evaporation : Les phénomènes d'évaporation peuvent s'avérer très différents en fonction des propriétés de la phase porteuse. En effet, si le spray est injecté dans une chambre où règne une température et une pression relativement uniforme, alors les gouttelettes atteindront très vite leur niveau de saturation et s'évaporeront en suivant une loi relativement simple (diminution linéaire de la surface). En revanche, si de fortes variations de la température

ou de la pression sont présentes dans la chambre, alors, les lois d'évaporation deviennent très complexes et propres à chaque goutte de l'écoulement.

Mélange : Un des phénomènes essentiels au sein de ces chambres de combustion concerne, bien sur, la turbulence qui agit à tous les niveaux : dispersion du spray, micro-mélange turbulent et mélange aux grandes échelles de la vapeur de combustible avec l'oxydant et enfin, mélange éventuel des gaz brûlés au sein du spray influençant ainsi fortement les phénomènes d'évaporation.

Combustion : Et enfin, la combustion aura lieu au sein du combustible évaporé. Tous les régimes de combustion (prémélangé, non-prémélangé, partiellement prémélangé) peuvent se rencontrer dans la chambre. De plus les problèmes d'extinction, ou encore de retour de flamme (ou flashback) au coeur du spray peuvent apparaître.

L'objectif à long terme des chercheurs se consacrant à l'étude des chambres de combustion est d'être à même de comprendre, de prédire et de contrôler l'ensemble de ces phénomènes. Pour cela, deux voies principales peuvent être suivies : les mesures expérimentales et la modélisation numérique, tous deux associées au calcul analytique.

Les grandes difficultés de mesure de certains paramètres de l'écoulement ont conduit la communauté scientifique à utiliser la modélisation numérique comme autre outil de recherche et de développement. Cependant, si les problèmes de modélisation de la combustion turbulente au sein d'un milieu purement gazeux commencent à être bien connus et, pour la majeure partie d'entre eux, maîtrisés, ce n'est plus du tout le cas lorsque une phase liquide évolue au sein d'un oxydant gazeux. L'apparition de termes sources de masse directement liés à la présence dispersée de gouttelettes de combustible en cours d'évaporation modifie totalement la topologie de la vapeur de combustible amenée à être brûlée. Contrairement à un écoulement gazeux où un certain équilibre s'établit entre la dissipation scalaire et la création locale de fluctuations à cause des gradients moyens, de nouveaux termes sources non négligeables et très localisés apparaissent [60]. Non seulement ces nouveaux termes nécessitent des fermetures afin d'être correctement pris en compte dans les chambres de combustion mais de plus ils modifient sensiblement les termes 'classiques' de production-dissipation, et de distribution au sein de la phase gazeuse nécessitant ainsi le développement de nouveaux modèles. De même, la présence du spray peut fortement modifier l'écoulement turbulent lui même en augmentant ou en diminuant

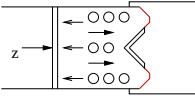
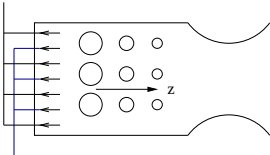
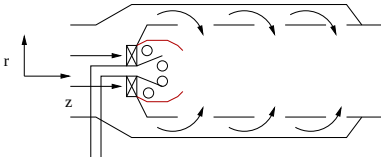
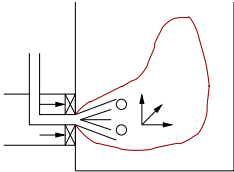
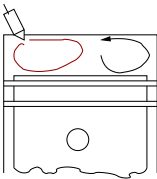
localement l'énergie cinétique de la turbulence, en créant des structures secondaires dans le sillage des gouttes, ou des agglomérations de gouttes, ou encore en supprimant certaines gammes de tourbillons [33]. Ces quelques exemples montrent que l'inclusion d'une nouvelle phase liquide au sein d'un gaz modifie considérablement la physique de l'ensemble des écoulements concernés. Les modèles de turbulence, de mélange, de combustion existant peuvent ne plus s'appliquer et, de même, de nouveaux termes apparaissent nécessitant des fermetures. Pour cela, il est nécessaire de comprendre la physique des différents phénomènes qui ont été résumés dans la figure 1. Ensuite, il sera possible de déterminer si les modèles existant pour les écoulements gazeux peuvent être étendus aux écoulements diphasiques et sinon, il faudra en développer de nouveaux.

L'objectif de ce travail de thèse est d'utiliser les méthodes de simulation numérique les plus précises possibles afin d'effectuer l'analyse physique de certains phénomènes présents au sein d'un écoulement diphasique. Pour cela, un code de simulation numérique directe (DNS pour Direct Numerical Simulation) a été utilisé afin de décrire l'évolution de la phase gazeuse compressible. Cependant, la présence de la phase liquide nécessitant un modèle, une description Lagrangienne de cette dernière a été mise en œuvre. Chaque goutte de l'écoulement sera donc suivie très précisément par quatre équations d'évolution (position, vitesse, taille, température). La DNS des écoulements gazeux permet de résoudre les équations de Navier-Stokes compressibles complètes. Ainsi, dans le cas d'un écoulement turbulent, l'ensemble des structures tourbillonnaires sont simulées depuis l'échelle intégrale jusqu'aux échelles dissipatives de Kolmogorov. Cependant, cette précision a un coût. En effet, seules des géométries simples peuvent être envisagées et les turbulences très énergétiques ne pourront être simulées car sinon, les temps calculs deviendraient exorbitants.

De part ces limitations, l'ensemble des phénomènes représentés figure 1 ne pourra donc être étudié simultanément avec la DNS. De plus il serait extrêmement difficile de discerner les caractéristiques précises de telle ou telle propriété de l'écoulement si toutes les interactions entre la turbulence, le spray et la combustion entrent en jeu simultanément. En revanche, il est possible d'isoler certains de ces phénomènes dans des configurations simples afin d'étudier leur impact précis sur l'écoulement. Ce travail a donc été principalement basé sur la propagation des flammes au sein de sprays laminares ou turbulents. Ce sont donc principalement

les corrélations Spray/Combustion qui ont été étudiées au travers de l'analyse de la structure des flammes laminaires et turbulentes, de leurs mécanismes de propagation, de leurs limites d'allumage et d'extinction.

Ce travail de thèse s'organise en quatre chapitres. Tout d'abord, une description détaillée des équations utilisées pour la Simulation Numérique Directe de la combustion diphasique est proposée avec, en préambule, une bibliographie non exhaustive dédiée aux travaux effectués en DNS. Le chapitre suivant est consacré à la description du modèle chimique utilisé dans le code de DNS, avec tout d'abord une définition des paramètres classiques de la combustion, puis une présentation de la cinétique de base et de ses problèmes, et enfin une nouvelle loi est proposée. Dans le troisième chapitre, une étude des flammes diphasiques laminaires est réalisée. Dans un premier temps, la notion de richesse d'un mélange est détaillée. Ensuite, une étude analytique portant sur la dynamique d'évaporation des gouttes est proposée. Enfin, la simulation de la propagation d'une flamme au sein d'un nuage de gouttes est abordée afin d'étudier la structure des flammes en fonction de la topologie du combustible liquide. L'étude des flammes turbulentes diphasiques fait l'objet du dernier chapitre. Des DNS de la phase gazeuse d'un problème d'injection de sprays sont effectuées et aux vues des diverses structures de flammes observées, un diagramme de combustion est proposé.

Application	Configuration	Structure
From: Kuo, "Principles of combustion", ISBN 0-471-62605-8		
Prevaporizing system : afterburners, lean combustors, carburetors, ramjets		Steady nonburning
Liquid-fueled rocket engine		Steady, more or less premixed
Gas-turbine combustors		Steady, diffusion flame
Industrial furnaces		Steady, diffusion flame
Diesel engine		Transient, diffusion flame, ignition characteristics needed

P0.1. - Schéma des différents systèmes industriels impliquant la combustion de spray, créé par K.K. Kuo [35].

Chapitre 1

Equations de la DNS diphasique

La résolution directe, sans modèle ni approximation, des équations de transport de la mécanique des fluides permet d'étudier de manière approfondie des phénomènes physiques fondamentaux tout en étant certain de la qualité des résultats observés (dans la limite de validité des équations de Navier-Stokes). Malgré de fortes restrictions (géométries simples, temps de calcul importants, faible intensité de la turbulence), l'utilisation de méthodes numériques quasi-spectrale permet de résoudre précisément les équations. La qualité et la précision des résultats obtenus font de la DNS un outil précieux pour l'analyse et le développement de modèles physiques. Avec le développement récent des calculateurs à hautes performances, de nombreux travaux se sont consacrés à la simulation numérique directe des écoulements turbulents au cours des 25 dernières années (cf fig 1.1).

Après des calculs dédiés aux écoulements inertes ([65, 39]) la DNS a été très rapidement étendue aux écoulements réactifs afin d'étudier la combustion prémélangée, partiellement prémélangée ou non-prémélangée dans les écoulements purement gazeux. ([28, 51, 76]. Un état de l'art très détaillé peut être trouvé dans le récent livre de Poinso et Veynante [53] et de nombreuses applications sont proposées dans l'ouvrage collectif édité par Baritaud *et al* [1]. L'ensemble de ces travaux montre l'apport très important de la DNS dans la compréhension des interactions très complexes entre la combustion et la turbulence.

La première étude d'un écoulement turbulent homogène isotrope avec des particules solides a été réalisée par Riley et Patterson en 1974 [63] avec une DNS spectrale couplée de manière non-interactive (one-way: les gouttes n'agissent pas sur l'écoulement) avec un petit nombre

de particules. L'objectif de ces simulations était l'étude de l'impact de la masse des particules sur leurs corrélations de vitesse. Par la suite, Elgobashi et Truesdell [21] ont poursuivi les recherches sur la dispersion de particules solides dans une turbulence spatialement décroissante en utilisant une description complète de l'équation du mouvement des particules. Parallèlement, Squires et Eaton [71] ont réalisé la simulation d'un écoulement turbulent stationnaire diphasique, avec des couplages non-interactifs (one-way) et interactifs (two-way). Plus récemment, Eaton et Fessler [19] ont pu montrer les effets sur la turbulence d'une distribution préférentielle de particules dispersées dans un écoulement.

A la fin des années 90, les chercheurs ont commencé à s'intéresser à la simulation de la dispersion de particules dont la taille varie au cours du temps. Mashayek *et al* [23], et Réveillon et Vervisch [60] ont donc utilisé la DNS pour étudier la dispersion de gouttes en évaporation dans un écoulement turbulent. Dans les calculs de Mashayek [23], la phase porteuse était considérée comme incompressible et l'évaporation des gouttes était modélisée par une relation linéaire entre le temps et la surface (loi du d^2) ce qui impliquait un couplage "one-way". Mashayek a ainsi montré que la dispersion du diamètre des gouttes en évaporation s'effectue selon un loi Gaussienne. Ce résultat étant fondamental pour le développement ultérieur de modèles de dispersion de spray. Ensuite Réveillon et Vervisch [60] ont effectué des simulations interactives (ou two-way) de gouttes en évaporation dans un fluide pleinement compressible. Ils ont étudié la topologie de la fraction massique de combustible évaporé au sein de l'écoulement turbulent et ont montré que les termes sources nouveaux apparaissant au sein de l'équation de la fraction de mélange ne sont pas négligeables et qu'un modèle permettant de les prendre en compte a été développé. Miller et Bellan ([46]) se sont, quand à eux, intéressés aux effets du rapport de charge de masse liquide, du nombre de Stokes initial ainsi que de la température initiale des gouttes et de la tri-dimensionalité de l'écoulement sur la croissance d'une couche de mélange. En effet, ils ont montré qu'elle était atténuée en présence d'un rapport de charge de masse liquide important, que son état final dépendait de la température initiale des gouttes et qu'un nombre de Stokes initial compris entre 0.5 et 2 n'avait pas d'effet significatif sur l'évolution de la couche de mélange.

Ce n'est que très récemment que des DNS de la combustion turbulente de spray ont été menées à bien. Hormi la recherche effectuée au cours de cette thèse, seul Mashayek a travaillé

DNS d'écoulement turbulent avec particules	Inerte	Particules solides	- Riley et Patterson (1974) - Squires et Eaton (1991) - Elgobashi et Tuesdell (1992) - Maxey et al (1997) - Boivin et al (1998)
		Gouttes en évaporation	- Mashayek (1997) - Miller et Bellan (1999) - Réveillon
	Réactif	Gouttes inertes	Miller (2001)
		Gouttes réactives	- Calimez (1998) - Mashayek (1999) - Réveillon (2000) - CANNEVIÈRE (2003)

TAB. 1.1 – Synthèse non-exhaustive sur la DNS d'écoulement turbulent de spray.

sur le problème [44]. En effet, celui-ci s'est intéressé à la DNS de la dispersion de gouttes réactives dans une turbulence isotropique forcée à faibles nombres de Mach. La phase porteuse était considérée comme compressible et il utilisait un couplage interactif (ou two-way). Il s'est intéressé aux effets de la richesse et du coefficient de dégagement de chaleur et a montré que l'évaporation des gouttes joue un rôle important dans les premières étapes de la combustion et ce, quelque soit la richesse initiale et qu'il y avait une forte corrélation entre la concentration des gouttes et le taux de réaction. Dans ses simulations, il a également remarqué une distribution préférentielle des gouttes, qui joue un rôle important dans la structure des zones de réaction.

Comme le montre cette courte bibliographie, la DNS est un outil idéal pour l'analyse des phénomènes physiques présents dans les écoulements turbulents réactifs ou encore dans l'analyse de la dispersion de particules solides ou liquides (cf tab 1.1). En revanche, très peu de travaux se sont consacrés à ce jour à la simulation numérique directe de la combustion de spray.

L'un des objectifs majeurs de ce travail de thèse est donc d'étendre les capacités numériques des outils de DNS aux écoulements diphasiques afin de pouvoir étudier les phénomènes complexes se nichant au sein des interactions flammes-gouttes-turbulence.

L'ajout d'une phase supplémentaire au sein d'un écoulement gazeux s'avère être une opération délicate. En effet, de fortes variations de la masse volumique apparaissent, rendant difficile l'utilisation de méthodes numériques non-dissipatives d'ordre élevé. De plus il faut gérer des flux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie au niveau de l'interface liquide/gaz ou solide/gaz, alors que les caractéristiques physiques de ces échanges sont mal connues.

Malgré l'ensemble des difficultés à résoudre, Calimez [8] a réussi la simulation de la combustion de quelques gouttes grâce à une méthode de reconstruction d'interface. Cependant, les contraintes numériques sont telles que seules une dizaine de gouttes traitées de manière bi-dimensionnelles ont pu être mises en œuvre. Il est donc impossible d'effectuer la simulation numérique directe complète de la dispersion, de l'évaporation et de la combustion d'un spray turbulent. C'est pourquoi il est nécessaire d'utiliser un modèle pour la phase dispersée.

Il existe deux formulations possibles permettant de décrire la présence d'une phase liquide polydispersée dans un écoulement. En effet soient les gouttes peuvent être considérées comme un ensemble statistique dont les données sont connues en tout point du maillage (modèle Eulerien) soit chaque goutte est suivie de manière individuelle durant son existence (modèle Lagrangien).

Description Eulerienne : Dans ce cas, la phase dispersée est considérée comme un champ continu caractérisé par une concentration en particules. En chaque point du maillage, est alors définie une fonction densité de probabilité (PDF pour Probability Density Function) permettant de déterminer en tout point le nombre de gouttes avec une vitesse, une température et une taille données. L'avantage d'un couplage Eulerien/Eulerien est qu'il est facile à réaliser, et qu'il permet de modéliser l'évaporation de gouttes et la combustion. Toutefois, les modèles utilisés ont des difficultés pour prendre en compte des phénomènes complexes comme les collisions entre gouttes, la coalescence, les interactions particules/paroi ou le couplage "two-way".

Description Lagrangienne : Ce type de méthode est couramment utilisé dans les codes industriels du fait de son fort potentiel quant à la précision des calculs. Elle est particulièrement bien adaptée à la Simulation Numérique Directe puisqu'elle introduit peu de diffusion numérique. Ainsi, les trajectoires des particules dans l'espace des phases sont résolues

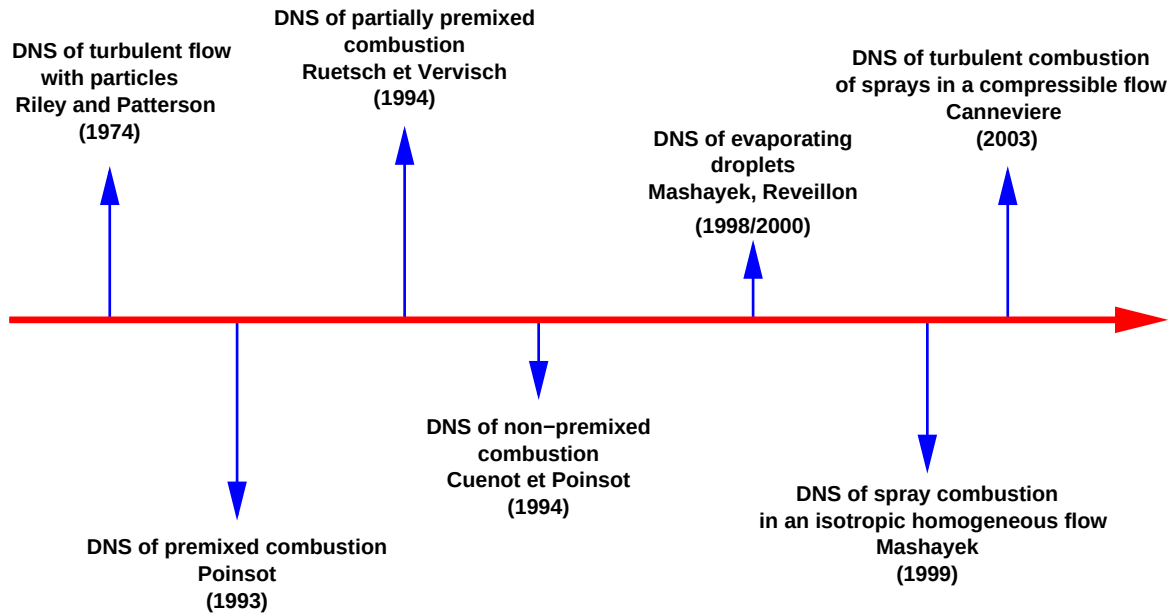


FIG. 1.1 – *Progression des configurations de simulations numériques directes.*

exactement. Pour les codes industriels, cette approche est d'autant plus précise que le nombre d'éléments par échantillon suivi dans l'espace des phases est élevé. Un autre des avantages de cette méthode est qu'elle prend en compte le couplage two-way, et notamment les transferts de masse et de chaleur dans le cas de l'évaporation de gouttes. C'est cette approche Lagrangienne que nous utiliserons dans nos simulations.

Le spray est donc composé d'un ensemble de gouttelettes individuelles suivies de façon Lagrangienne et convectées par un écoulement turbulent. Trois systèmes numériques sont décrits par la suite : les équations de suivi de particules Lagrangiennes, les équations de la phase porteuse et enfin le couplage entre la phase dispersée et l'écoulement qui est résolu dans un contexte Eulérien.

1.1 Phase dispersée

Les équations d'évolution de la position, de la vitesse, de la surface et de la température d'un nombre quelconque (N) de gouttes doivent être résolues. Ces équations vont être détaillées avec, pour chacune, la liste des éventuelles approximations qui ont été utilisées. Dans nos simulations,

les écoulements autour et à l'intérieur d'une goutte isolée ne sont pas résolus et des modèles classiques sont utilisés pour la phase liquide [24, 36, 70].

1.1.1 Evolution de la surface

Afin de déterminer la masse de liquide quittant une goutte qui s'évapore, il est nécessaire de résoudre les équations quasi-stationnaires de la mécanique des fluides permettant de connaître le profil des couches limites de vapeur et de température à la surface d'une goutte. Dans un premier temps la taille de celle-ci est considérée comme constante grâce à une alimentation interne de la goutte en combustible.

Les épaisseurs de couche limite de diffusion des espèces et de la température, sont définies respectivement δ_Y et δ_T , au delà desquelles tous les flux et transferts liés à l'évaporation de la goutte ne sont plus valables. Les propriétés dites "à l'infini" du fluide sont alors appliquées : $Y_F(\delta_Y) = [Y_F]_\infty$ et $T(\delta_T) = [T]_\infty$.

Un éventuel mouvement convectif autour de la goutte peut alors être pris en compte en modifiant localement l'épaisseur de film. Pour cela, deux nombres sans dimension sont introduits :

- le nombre de Sherwood lié à la convection :

$$Sh_c = 2 \frac{\delta_Y}{\delta_Y - r_s} , \quad (1.1)$$

où r_s est le rayon de la goutte.

Ainsi, pour une goutte placée dans une atmosphère au repos, c'est-à-dire sans convection, $\delta_Y \rightarrow \infty$, et l'on obtient la valeur théorique : $Sh_c = 2$.

- le nombre de Nusselt lié à la convection :

$$Nu_c = 2 \frac{\delta_T}{\delta_T - r_s} , \quad (1.2)$$

lui aussi égal à deux dans un écoulement au repos.

En modifiant ces deux paramètres, la théorie de l'évaporation d'une goutte développée initialement pour une atmosphère au repos peut être étendue au cas d'une goutte placée dans un champ convectif.

1.1.1.1 Evaporation

L'évaporation d'une goutte peut-être représentée grâce à une quantité normalisée B_k appelée nombre de transfert de masse, ou plus communément nombre de Spalding. Le taux d'évaporation, nécessaire dans le calcul de la masse évaporée, est une variable qui dépend du nombre de Spalding. L'évaporation des gouttes de combustible dépend des propriétés de la phase gazeuse qui les entoure (température, pression, fraction massique de combustible gazeux). Le paramètre de Spalding est défini par :

$$b = \frac{Y_k}{Y_k^s - 1} \quad , \quad (1.3)$$

où $b = b(r)$ représente le rapport entre la fraction massique de combustible en tout point r tel que $r_s < r < \delta_Y$ et la fraction massique des espèces autres que le combustible, à la surface de la goutte. Le nombre de Spalding est relié aux flux de combustible gazeux entre la surface de la goutte (Y_k^s) et le gaz environnant à la position de la goutte ($Y_F(\mathbf{X}_k)$) (fig 1.2) par la relation :

$$B_k = b_\infty - b_s \quad , \quad (1.4)$$

soit :

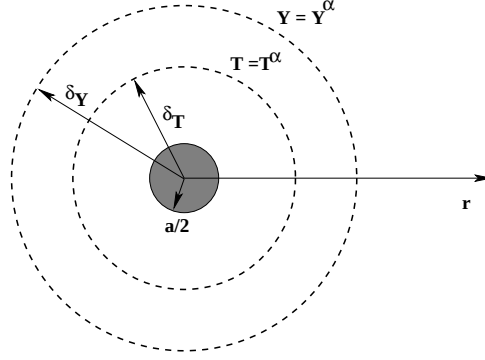
$$B_k = \frac{Y_k^s - Y_F(\mathbf{X}_k)}{1 - Y_k^s} \quad . \quad (1.5)$$

Quand la fraction massique de combustible à la saturation Y_k^s est plus grande que la fraction massique de combustible gazeux au voisinage de la goutte, la gouttelette s'évapore ($B_k > 0$). Dans le cas contraire, B_k est nul et le diamètre reste constant. Les éventuels cas de condensation ne sont pas pris en compte.

En résolvant les équations de conservation de la masse et de la température à la surface d'une goutte qui s'évapore dans une atmosphère au repos, deux nombres de transfert peuvent être déterminés : le nombre de transfert de masse (ou nombre de Spalding) et le nombre de transfert thermique. Pour cela, l'équation de transport de la fraction massique d'un combustible dans un repère sphérique est utilisée [74], pour déterminer le nombre de Spalding. Une seconde équation, similaire est utilisée pour déterminer l'énergie des gaz autour de la goutte :

$$\rho r^2 U_r \frac{dY_F}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \rho D^* \frac{dY_F}{dr} \right) \quad , \quad (1.6)$$

$$\rho U_r r^2 \frac{dC_p T}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \lambda^* \frac{dT}{dr} \right) \quad . \quad (1.7)$$

FIG. 1.2 – *Evaporation et combustion d'une goutte.*

où U_r est la composante radiale du vecteur vitesse du gaz environnant. Les conditions limites appliquées ici sont :

$$\begin{cases} Y_F = [Y_F]_\infty & \text{pour } r = \delta_y \quad , \\ Y_F = [Y_F]_s = Y_k^s & \text{pour } r = r_s \quad , \end{cases} \quad (1.8)$$

et

$$\begin{cases} T = T_\infty & \text{pour } r = r_\infty \quad , \\ T = T_k^s & \text{pour } r = r_s \quad . \end{cases}$$

Le flux de Stephan pour la fraction massique de combustible à la surface de la goutte s'écrit :

$$D_s^* \left[\frac{dY_F}{dr} \right]_s = U_{rs} [Y_F]_s - U_{rs} \quad , \quad (1.9)$$

avec l'hypothèse suivante pour le coefficient de diffusion des espèces :

$$\rho D^* = \rho_s D_s^* = \text{constante} \quad .$$

De plus, la condition liée au gradient de température donne :

$$\lambda^* \left[\frac{dT}{dr} \right]_s = h_c (T_\infty - T_k^s) = \rho_s U_{rs} L_v + \frac{Q_l}{\pi a_k^2} \quad , \quad (1.10)$$

où Q_l est l'énergie nécessaire pour chauffer la goutte. Enfin, la conservation de la masse autour de la goutte permet de fermer le système d'équation ci-dessus :

$$\rho r^2 U_r = \rho_s r_s^2 U_{rs} = \text{constante} \quad . \quad (1.11)$$

D'après la relation 1.3, le flux de Stephan peut s'écrire :

$$U_{rs} = D^* \left[\frac{db}{dr} \right]_s , \quad (1.12)$$

et l'équation 1.6 devient :

$$\rho r^2 U_r \frac{db}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \rho D^* \frac{db}{dr} \right) , \quad (1.13)$$

avec les conditions limites suivantes :

$$\begin{cases} b = b_\infty & \text{en } r = \delta_Y , \\ b = b_s & \text{en } r = r_s , D^* \left[\frac{db}{dr} \right] = U_{rs} . \end{cases}$$

En intégrant les équations 1.13 et 1.7, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \rho_s r_s^2 U_{rs} (b - b_s + 1) &= r^2 \rho_s D^* \frac{db}{dr} , \\ \rho r^2 U_r C_p T &= r^2 \lambda^* \frac{dT}{dr} + C . \end{aligned}$$

Nous avons donc :

$$\frac{r_s^2 U_{rs}}{D^*} \frac{dr}{r^2} = \frac{db}{b - b_s + 1} , \quad (1.14)$$

et en utilisant les relations 1.10 et 1.11 :

$$\rho_s r_s^2 U_{rs} \left(T - T_k^s + \frac{h_c (T_\infty - T_k^s)}{\rho_s r_s^2 U_{rs}} \right) = r^2 \lambda^* \frac{dT}{dr} . \quad (1.15)$$

Après avoir intégré l'équation 1.14, et en utilisant les conditions limites loin de la goutte, il vient:

$$\frac{r_s^2 U_{rs}}{D^*} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{\delta_Y} \right) = \ln \left(\frac{b_\infty - b_s + 1}{b - b_s + 1} \right) ,$$

soit

$$\frac{r_s^2 U_{rs}}{D^*} = \frac{r \delta_Y}{\delta_Y - r} \ln \left(\frac{b_\infty - b_s + 1}{b - b_s + 1} \right) .$$

Le flux total de masse quittant la surface vaut donc :

$$r_s U_{rs} = \frac{1}{2} S_{hc} D^* \ln (b_\infty - b_s + 1) ,$$

d'où

$$r_s U_{rs} = \frac{1}{2} S_{hc} D^* \ln(1 + B_k) \quad . \quad (1.16)$$

De la même manière, en intégrant une seconde fois l'équation 1.15, nous obtenons la relation suivante :

$$\ln \left(T - T_k^s + \frac{h_c (T_\infty - T_k^s)}{\rho_s r_s^2 U_{rs}} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\rho_s r_s^2 U_{rs} C_p}{\lambda^*} + C$$

D'après la condition limite en $r = \delta_T$, nous avons :

$$\ln \left(\frac{T_\infty - T_k^s + \frac{h_c (T_\infty - T_k^s)}{\rho_s r_s^2 U_{rs}}}{T - T_k^s + \frac{h_c (T_\infty - T_k^s)}{\rho_s r_s^2 U_{rs}}} \right) = \frac{\rho_s r_s^2 U_{rs} C_p}{\lambda^*} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{\delta_T} \right)$$

De plus, quand $r = r_s$:

$$\ln \left(\frac{\rho_s U_{rs} C_p}{h_c} + 1 \right) = \frac{\rho_s r_s U_{rs} C_p}{\lambda^*} \left(\frac{\delta_T - r_s}{\delta_T} \right) \quad ,$$

soit,

$$\ln \left(\frac{\rho_s U_{rs} C_p}{h_c} + 1 \right) = \frac{2}{N_{uc}} \frac{\rho_s r_s U_{rs} C_p}{\lambda^*} \quad . \quad (1.17)$$

Enfin, sachant que les nombres de transfert massique et thermiques s'écrivent :

$$\begin{cases} B_k &= b_\infty - b_s \quad , \\ B_T &= \frac{\rho_s U_{rs} C_p}{h_c} \quad . \end{cases}$$

et que le taux d'évaporation est défini par la relation $W_v = 4\pi \rho_s r_s^2 U_{rs}$, nous obtenons alors deux expressions pour le taux d'évaporation:

$$\begin{aligned} W_v &= \pi \rho_s a_k S_{hc} D^* \ln(1 + B_k) \quad , \\ W_v &= \pi a_k C_p^{-1} \lambda^* N_{uc} \ln(1 + B_T) \quad . \end{aligned}$$

où a_k est le diamètre de la goutte k .

Les deux expressions du taux d'évaporation 1.18 et 1.18 doivent être égales. Il est donc possible de déduire une relation entre les nombres de Spalding massique et thermique, à savoir :

$$B_T = (B_k + 1)^{\frac{S_{hc}}{N_{uc}} \frac{Pr}{Sc}} - 1 \quad . \quad (1.18)$$

Le temps de relaxation d'évaporation de la goutte, défini par la relation $\beta_k^{(a)} = (\rho_d r_s^2) / (2\rho r_s U_{rs})$ devient :

$$\beta_k^{(a)} = \frac{\rho_d r_s^2}{\rho D^* S_{hc} \ln(1 + B_k)} \quad , \quad (1.19)$$

ou encore

$$\beta_k^{(a)} = \frac{\rho_d S_c a_k^2}{4 S_{hc} \mu^* \ln(1 + B_k)} \quad , \quad (1.20)$$

avec $r_s = \frac{1}{2}a_k$, et $\rho D^* = \mu^*/S_c$ et ρ_d la densité des gouttes.

La méthode pour déterminer le nombre de transfert B_k peut varier avec le niveau de complexité souhaité, la précision et le coût de calcul. Plusieurs méthodes sont proposées ici pour calculer cette quantité, selon que ce nombre soit considéré constant ou variable.

1.1.1.2 Méthode de saturation (Modèle Saturation Full Droplet (SFD))

La relation de Clausius-Clapeyron pour le changement de phase permet de calculer le nombre de Spalding. Cette relation reste valable dans le cas où nous sommes loin de l'état critique :

$$\frac{\ln(P_k^s)}{dT} \approx \frac{L_v}{R_{uF} T^2} \quad , \quad (1.21)$$

où R_{uF} est la constante des gaz parfaits liée au combustible et L_v est la chaleur latente de vaporisation.

En intégrant par rapport à un état de référence et en considérant $L_v = cte$, on obtient :

$$\ln\left(\frac{[P_F]_s}{P_{ref}}\right) = -\frac{L_v}{R_{uF}} \left(\frac{1}{T_k^s} - \frac{1}{T_{ref}}\right)$$

soit

$$P_k^s = P_{ref} \exp\left(-\frac{L_v}{R_{uF}} \left(\frac{1}{T_k^s} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \quad (1.22)$$

où $[P_F]_s = P_k^s$ et P_{ref} et T_{ref} sont des paramètres de référence. La température d'ébullition à la pression de référence égale à l'unité a été utilisée. La température T_k^s de la gouttelette peut varier au cours du temps mais reste uniforme au sein du liquide. En effet, le coefficient de diffusion est

supposé infini pour le liquide. Dans les simulations considérées, les flux énergétiques atteignant la surface de la goutte contribuent donc à l'évaporation du liquide et à l'élévation générale du niveau de température du liquide [24].

D'autre part, la fraction massique de combustible est définie par :

$$Y_k^s = \frac{X_F W_F}{X_F W_F + (1 - X_F) W_O} ,$$

ou encore

$$Y_k^s = \left(1 + \frac{W_O}{W_F} \left(\frac{1}{X_F} - 1 \right) \right)^{-1} , \quad (1.23)$$

où W_F et W_O sont les masses moléculaires du combustible et d'oxydant et X_F la fraction molaire définie par $X_F = P_k/P$. Ainsi, la fraction massique de combustible à la surface de la goutte vaut :

$$Y_k^s = \left(1 + \frac{W_O}{W_F} \left(\frac{P(\mathbf{X}_d)}{P_k^s} - 1 \right) \right)^{-1} .$$

avec $X_F^s = P_k^s/P(\mathbf{X}_d)$.

1.1.1.3 Indexation artificielle de la température (IAT)

En résolvant le système composé des équations 1.22, 1.23, et 1.33 dans une atmosphère au repos, il est possible déterminer les paramètres de saturation à l'interface de la goutte comme une fonction de la température, de la pression et de la fraction massique de combustible gazeux. Dans les configurations étudiées, le niveau moyen de pression reste égal à 1 et les fluctuations ne sont pas suffisantes pour modifier de façon significative le taux d'évaporation des gouttes. De plus, l'évaporation des gouttes dans un milieu dilué conduit à de faibles taux de fraction massique de combustible gazeux ($Y_F < 0.2$). Par conséquent, la température de l'écoulement environnant est un paramètre fréquent pour déterminer le taux d'évaporation grâce au nombre de transfert $B(T, P, Y_F)$. Une base de données de nombre de Spalding $B(T, P, Y_F)$ pour différents cas a été générée. En première approximation, il apparaît que la dépendance en température de B_k pour une pression et une fraction massique de combustible données peut être considérée comme linéaire (fig 1.3-(a')). Le modèle IAT peut être défini par :

$$B_k(T) = \Pi T(\mathbf{X}_d) , \quad (1.24)$$

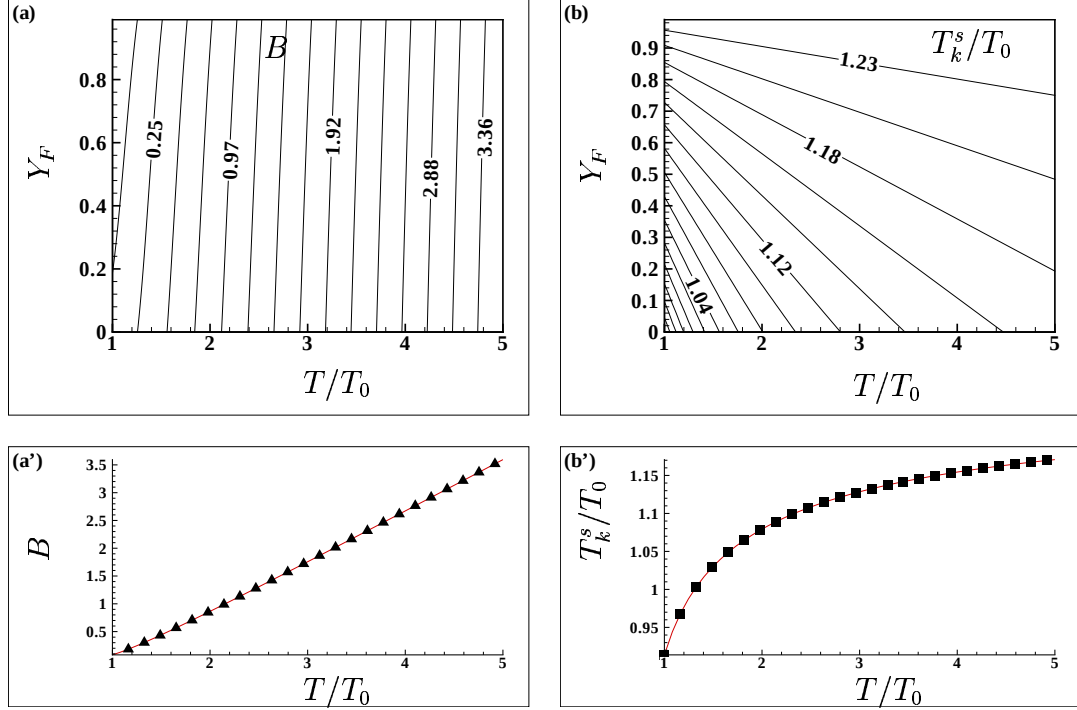


FIG. 1.3 – Limites de saturation (nombre de transfert B (a) et température de la goutte T_k^s (b)) du *n*-heptane déterminées pour une pression environnante P égale à 1. Y_F et T/T_0 sont respectivement la fraction massique et la température du gaz environnant. (a') et (b') sont les profils correspondants ($B(T)$ et $T_k^s(T)$ resp.) quand $Y_F = 0$.

où Π est une constante. Dans ce cas, comme pour le modèle DSL, la goutte est considérée comme étant toujours à son niveau de saturation mais avec un paramètre externe variable : la température T . Ainsi, ni l'échange d'énergie avec l'écoulement ni l'échauffement de la goutte ne sont considérés et l'équation pour la température n'est pas résolue.

La constante Π est déterminée à partir de l'expression du temps d'évaporation des gouttes (1.19). Cette relation est valable pour un nombre de Spalding constant, c'est-à-dire que l'on se trouve dans le cas de la loi du diamètre au carré (diminution linéaire de la surface de la goutte). On peut par conséquent en déduire un nombre de Spalding théorique B_{k0} basé sur le temps de relaxation d'évaporation théorique $\beta_k^{(a)}$ des gouttes, que l'on souhaite :

$$B_{k0} = \exp \left(\frac{S_c \rho_d a_{k0}^2}{4 S_{hc} \mu^* \beta_k^{(a)}} \right) - 1 \quad , \quad (1.25)$$

où a_{k0} est le diamètre initial des gouttes. La constante Π est basée sur la température maximale dans les gaz brûlés. Ainsi, on a :

$$\Pi = \frac{\alpha}{1 - \alpha} B_{k0} \quad ,$$

où α est la chaleur de réaction réduite définie par la relation $\alpha = (T_b - T_u) / T_b$, et T_b et T_u sont respectivement les températures dans les gaz brûlés et les gaz frais.

Soit finalement :

$$\Pi = \frac{\alpha}{1 - \alpha} \left[\exp \left(\frac{S_c \rho_d a_{k0}^2}{4 S_{hc} \mu^* \beta_k^{(a)}} \right) - 1 \right] \quad . \quad (1.26)$$

En utilisant ce modèle, il est possible de modifier artificiellement le délai d'évaporation sans interférer sur les propriétés initiales des gouttes ou les paramètres prescrits de la chimie.

1.1.1.4 Loi du diamètre au carré (DSL)

Les équations de saturation 1.22, 1.23, et l'équation pour la température 1.33 sont coûteuses en temps. De plus, quand les gouttelettes atteignent les limites de la saturation, le nombre de Spalding est à peu près constant. C'est pourquoi de nombreux modèles de spray sont développés sur la base d'une loi du d^2 . Cette approximation n'est pas très loin de la réalité quand la température de l'écoulement gazeux est plus ou moins uniforme. La loi du d^2 conduit à une variation linéaire de la surface de la goutte en fonction du temps. En effet, cette équation a, dans ce cas là, une solution analytique :

$$\frac{dm}{dt} = -W_v \quad , \quad (1.27)$$

où $m = (\pi \rho_d a_k) / 6$ est la masse de la goutte et $W_v = \pi \rho_a S_{hc} D^* \ln(1 + B_k)$. Soit :

$$\frac{da_k^3}{dt} = -\frac{6}{\pi \rho_d} \pi \rho_a S_{hc} D^* \ln(1 + B_k) \quad ,$$

ou encore

$$\frac{da_k^2}{dt} = -\frac{4 S_{hc} \mu^*}{S_c \rho_d} \ln(1 + B_k) \quad .$$

En intégrant, on obtient :

$$a_k^2(t) = -\frac{4S_{hc}\mu^*}{S_c\rho_d} \ln(1 + B_k)t + \text{cte} \quad .$$

Or à l'instant $t = 0$, le diamètre de la goutte est a_{k0} , ce qui donne finalement :

$$a_k^2(t) = -\frac{4S_{hc}\mu^*}{S_c\rho_d} \ln(1 + B_k)t + a_{k0}^2 \quad . \quad (1.28)$$

Le temps de relaxation d'évaporation $\beta_k^{(a)}$ de la goutte peut être déterminé à chaque instant d'après la relation 1.28 :

$$\beta_k^{(a)} = \frac{\rho_d S_c a_{k0}^2}{4S_{hc}\mu^* \ln(1 + B_k)} \quad . \quad (1.29)$$

Ainsi, l'équation pour la masse 1.27 s'écrit :

$$\frac{da_k^2}{dt} = -\frac{a_k^2}{\beta_k^{(a)}} \quad . \quad (1.30)$$

1.1.2 Evolution de la température

Il est donc possible maintenant d'expliciter l'équation de l'énergie :

$$\frac{dmC_{pd}T_k}{dt} = W_v (H_c - L_v - T_k C_p) \quad , \quad (1.31)$$

où :

- T_k est la température de la goutte,
- C_{pd} est la chaleur spécifique de la goutte
- H_c est l'énergie gagnée par convection,
- L_v est l'énergie perdue par évaporation,
- $T_k^s C_p$ est l'énergie perdue par la masse disparue par évaporation.

Il vient alors :

$$m \frac{dC_{pd}T_k}{dt} = W_v (H_c - L_v) \quad , \quad (1.32)$$

avec $H_c = C_p(T(X_d) - T_k)/B_T$ et L_v constant. Comme C_{pd} est constant,

$$\frac{dT_k}{dt} = \frac{W_v}{mC_{pd}} (H_c - L_v) \quad ,$$

d'où

$$\frac{dT_k}{dt} = \frac{W_v}{mB_T} \frac{C_p}{c_{pd}} \left(T(X_d) - T_k - \frac{L_v B_T}{C_p} \right) ,$$

Soit,

$$\frac{dT_k}{dt} = \frac{6\mu^* N_{uc}}{\rho_d a_k^2} \frac{C_p}{C_{pd}} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \left(T(X_d) - T_k - \frac{L_v B_T}{C_p} \right) .$$

Remarquons ici que lorsque la goutte ne s'évapore pas, c'est-à-dire $B_T \rightarrow 0$, alors l'expression ci-dessus devient :

$$\frac{dT_k}{dt} = \frac{6\mu^* N_{uc}}{\rho_d a_k^2} \frac{C_p}{C_{pd}} (T(X_d) - T_k) .$$

De façon générale, l'équation pour la température s'écrit donc :

$$\frac{dT_k}{dt} = \frac{\left(T(X_d) - T_k - \frac{L_v B_T}{C_p} \right)}{\beta_k^{(T)}} , \quad (1.33)$$

avec

$$\beta_k^{(T)} = \frac{P_r}{6N_{uc}} \frac{C_{pd}}{C_p} \frac{\rho_d a_k^2}{\mu^*} \frac{B_T}{\ln(1 + B_T)} , \quad (1.34)$$

le temps de relaxation de chauffage des gouttes.

1.1.3 Equation du mouvement

La forme générale de l'équation du mouvement de la goutte est (formule de Riley ([62]):

$$m \frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \mathcal{F}' + \mathcal{G}' + \mathcal{M}' + \mathcal{P}' + \mathcal{B}' , \quad (1.35)$$

où $\mathcal{F}'$, $\mathcal{G}'$, $\mathcal{M}'$, $\mathcal{P}'$, $\mathcal{B}'$ sont respectivement la force de trainée, la force de gravité, la force de masse ajoutée, la force de pression exercée sur la goutte et la force de Basset. La force de masse ajoutée est induite par l'entraînement du fluide environnant par la particule lors de ses accélérations et décélérations successives. La force de Basset, appelé encore terme d'histoire, permet de prendre en compte le temps d'établissement de la couche limite.

Notre objectif est d'avoir un système simple mais traduisant les interactions fondamentales gouttes-gaz afin d'étudier les effets de l'évaporation des brouillards sur les régimes de combustion. Ainsi, comme la masse volumique des gouttes est très grande devant celle du fluide, les

termes de gravité, de masse virtuelle, de pression sont négligeables dans l'équation du mouvement. Le terme de Basset l'est également. De même, étant donné que nous travaillons dans le cas d'une phase dispersée, les interactions gouttes-gouttes sont supposées négligeables. Ainsi, seul le terme de trainée est pris en compte dans l'équation du mouvement. Cette équation se réduit donc à :

$$m \frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \mathcal{F}' \quad . \quad (1.36)$$

avec $m = \pi \rho_d a_k^3 / 6$.

Le vecteur $\mathcal{F}'$ est lié aux contraintes visqueuses exercées par le fluide sur la surface de la goutte et est défini par la relation :

$$\mathcal{F}' = \frac{\pi}{8} \rho a_k^2 C_D |\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k| (\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k) \quad . \quad (1.37)$$

$\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t)$ et C_D sont respectivement la vitesse du gaz à la position de la goutte et le coefficient de trainée défini par la relation :

$$C_D = \frac{24}{Re_k} C_{u_k}$$

$$C_{u_k} = 1 + \frac{Re_k^{2/3}}{6} \quad , \quad Re_k = \frac{\rho |\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k| a_k}{\mu} Re_e \quad (1.38)$$

$\mathbf{V}_k$ est la vitesse de la goutte, C_{u_k} est un coefficient correctif introduit pour prendre en compte les variations du facteur trainée, Re_k est le nombre de Reynolds lié à la goutte.

L'équation du mouvement s'écrit donc :

$$m \frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \frac{\pi}{8} \rho a_k^2 C_D |\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k| (\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k) \quad ,$$

ou encore

$$\frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \frac{3\rho}{4\rho_d a_k} C_D |\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k| (\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k) \quad .$$

On obtient finalement :

$$\frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \frac{1}{\beta_k^{(V)}} (\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k) \quad , \quad (1.39)$$

où $\beta_k^{(V)}$ est un temps de relaxation cinétique défini par :

$$\beta_k^{(V)} = \frac{\rho_d a_k^2}{18 C_{u_k} \mu^*} \quad . \quad (1.40)$$

1.1.4 Approche Lagrangienne pour les gouttes

L'approche Lagrangienne permet d'estimer les propriétés des gouttes en résolvant un système de quatre équations. Pour chaque goutte, les paramètres suivant sont résolus : le vecteur position (X_k), le vecteur vitesse (V_k), le diamètre (a_k) et la température (T_k). Les équations pour les gouttes sont donc les suivantes :

$$\frac{d\mathbf{a}_k^2}{dt} = -\frac{\mathbf{a}_k^2}{\beta_k^{(a)}} , \quad (1.41)$$

$$\frac{d\mathbf{X}_k}{dt} = \mathbf{V}_k , \quad (1.42)$$

$$\frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \frac{1}{\beta_k^{(V)}} (\mathbf{U}(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k) , \quad (1.43)$$

$$\frac{dT_k}{dt} = \frac{1}{\beta_k^{(T)}} \left(T(\mathbf{X}_d) - T_k - \frac{B_k L_v}{C_p} \right) . \quad (1.44)$$

avec

$$\begin{aligned} \beta_k^{(a)} &= \frac{S_c}{4Sh_c} \frac{\rho_d}{\mu^*} \frac{a_k^2}{\ln(1 + B_k)} , \\ \beta_k^{(V)} &= \frac{\rho_d a_k^2}{18C_{uk}\mu^*} , \\ \beta_k^{(T)} &= \frac{P_r}{6Nu_c} \frac{C_{pd}}{C_p} \frac{\rho_d a_k^2}{\mu^*} \frac{B_k}{\ln(1 + B_k)} . \end{aligned}$$

Les nombres de Sherwood et de Nusselt convectifs sont égaux à deux dans une atmosphère au repos mais une correction est appliquée dans le cas d'un écoulement convectif. L'expression empirique de Faeth et Fendell [35], identique pour Sh_c et Nu_c ($Sh_c | Nu_c$), a été utilisée :

$$(Sh_c | Nu_c) = 2 + \frac{0.55 Re_k (S_c | P_r)}{(1.232 + Re_k (S_c | P_r)^{4/3})^{1/2}} . \quad (1.45)$$

1.2 Phase porteuse

La simulation numérique directe (ou DNS pour Direct Numerical Simulation) résout les équations de transport des variables instantanées décrivant les paramètres du fluide : la masse (scalaire), la quantité de mouvement (vecteur, 3 composantes) et l'énergie ou la température

(scalaire). A ces cinq variables peuvent s'ajouter des scalaires inertes ou réactifs liés à la chimie du fluide représentant les espèces ou le degré d'avancement d'une réaction.

Dans ce cas, l'ensemble des propriétés de la turbulence précédemment définies sont conservées, et notamment le spectre complet de la turbulence des plus grandes aux plus petites échelles. Cela implique un maillage fin, pouvant représenter les petites structures, d'un domaine dont la taille est suffisante pour contenir les plus gros tourbillons. D'où la nécessité d'avoir un nombre élevé de points (N_d^3) décrivant le domaine de calcul [53]. N_d^3 est directement lié au rapport de taille entre les grosses et les petites structures qui est égal à :

$$\frac{l}{\eta} = Re_t^{3/4}$$

Et donc

$$N_d^3 = \left(\frac{l}{\eta}\right)^3 = Re_t^{9/4}$$

Une des limites de la DNS sera la capacité de stockage et de traitement des données de l'ordinateur qui limitera les simulations aux faibles nombres de Reynolds.

De plus, la méthode numérique utilisée doit posséder des propriétés spectrales, c'est à dire, être d'ordre élevé et sans dissipation numérique afin que les évolutions spatiale et temporelle des variables aérothermochimiques soient les plus proches possibles de la réalité. La précision nécessaire du calcul a deux conséquences, d'une part un coût informatique élevé et d'autre part, la géométrie du problème doit rester relativement simple.

Les capacités de mémoire et de vitesse des plus récents ordinateurs n'autorisent pas (ou pas encore) la simulation d'écoulements dont le nombre de Reynolds est important.

1.2.1 Equations pour le gaz

L'écoulement gazeux est un fluide Newtonien compressible, qui est décrit dans un contexte Eulérien par les équations complètes de Navier-Stokes. Ces équations prennent en compte un couplage interactif avec une autre phase. Les équations de transport pour la masse volumique ρ , la quantité de mouvement selon chaque direction ρU_i , l'énergie E_t , les fractions massiques gazeuse de combustible Y_F et d'oxydant Y_O sont décrites ci-dessous :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_k}{\partial x_k} = \dot{m} \quad , \quad (1.46)$$

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i U_k}{\partial x_k} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ik}^*}{\partial x_k} + \dot{v}_i \quad , \quad (1.47)$$

$$\frac{\partial \rho E_t}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E_t + P) U_k}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\lambda^* \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial \sigma_{ik}^* U_k}{\partial x_i} + \rho \dot{\omega}_e + \dot{e} \quad , \quad (1.48)$$

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_F U_k}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D^* \frac{\partial Y_F}{\partial x_k} \right) + \rho \dot{\omega}_f + \dot{m} \quad , \quad (1.49)$$

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_O U_k}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D^* \frac{\partial Y_O}{\partial x_k} \right) + \rho \dot{\omega}_o \quad , \quad (1.50)$$

avec

$$\sigma_{ij}^* = \mu^* \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu^* \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$$

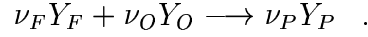
et l'équation d'état des gaz parfaits :

$$P = \rho r^* T$$

Les termes marqués d'un astérisque (*) sont des termes dont l'expression varie en fonction de la normalisation des équations. Dans les calculs de simulation numérique directe, la propagation des ondes acoustiques dans le domaine est prise en compte et leur vitesse est la plus importante. C'est pourquoi un adimensionnement basé sur les propriétés acoustiques des gaz frais est utilisé. Les variables choisies pour l'adimensionnement sont donc les suivantes : la vitesse du son u_0 , la viscosité de l'oxydant ν_0 , la taille δ_0 et la température T_0 . D'autre part, dans l'expression de la viscosité $\mu^* = \mu / R_e$, de la diffusion des espèces $D^* = (\rho^{-1} \mu) / (R_e S_c)$ et de la diffusivité de la température $\lambda^* = (C_p \mu) / (R_e P_r)$, le nombre de Reynolds basée sur l'acoustique du problème $R_e = u_0 \delta_0 / \nu_0$ apparaît. Enfin, les nombres de Prandtl P_r et de Schmidt S_c sont tous les deux égaux à 0.7, donc le nombre de Lewis est fixé à 1. Dans l'équation des gaz parfaits, $r^* = (\gamma - 1) / \gamma$ avec $\gamma = 1.4$.

1.2.2 Termes sources chimiques

Les termes sources chimiques présents dans les équations de transport pour la phase gazeuse sont obtenus en utilisant une loi d'Arrhénius décrivant une réaction simple de la forme :



pour des composants à masses molaires égales. Dans les simulations proposées ici, le rapport ν_o/ν_f est fixé à 15 afin que la valeur stoechiométrique de la fraction de mélange soit égale à 0.0625, ce qui correspond à la combustion du n-heptane dans de l'air.

Le terme source d'Arrhénius s'écrit de manière générale

$$\dot{\omega}_r = K(Y_F, Y_O, \nu_o, \nu_f, \rho) \exp(-T_a/T + T_a/T_b)$$

avec $K(Y_F, Y_O, \nu_o, \nu_f, \rho)$ une fonction préexponentielle permettant de déterminer les propriétés de la flamme. T_a est la température d'activation et T_b la température des gaz brûlés (T_0 : température des gaz non-brûlés). Grâce à K et à T_a , l'épaisseur et la vitesse de la flamme peuvent être contrôlées, quelle que soit la richesse de combustible dans le domaine.

Les termes sources chimiques sont directement déduits de l'expression de $\dot{\omega}_r$, qui sera détaillée dans le chapitre 2 :

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_f &= -\nu_F \dot{\omega}_r \\ \dot{\omega}_o &= -\nu_O \dot{\omega}_r \\ \dot{\omega}_e &= \frac{\alpha}{(\gamma - 1)(1 - \alpha)} (1 + \Phi_s) \nu_F \dot{\omega}_r \end{aligned}$$

Φ_s est le rapport d'équivalence de la réaction et α est le taux de dégagement de chaleur tels que

$$\alpha = (T_b - T_0)/T_b = 0.8$$

Cela nous donne un rapport 5 de température entre les gaz brûlés et les gaz frais.

1.3 Couplage Eulérien/Lagrangien

Le couplage entre les descriptions Eulérienne et Lagrangienne s'effectue en accumulant les termes sources liés à la présence des gouttes dans un volume $\mathcal{V}$ défini au voisinage de chaque

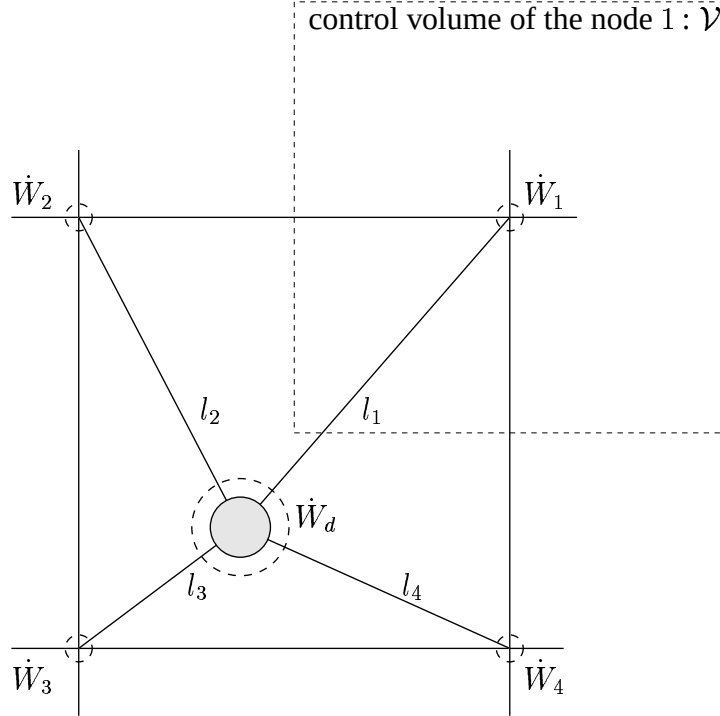


FIG. 1.4 – Exemple 2D de la répartition des termes sources Lagrangiens sur le maillage Eulérien, $\dot{W}_i = \dot{W}_d l_i / \sum_{k=1}^4 l_k$

noeud Eulérien (fig 1.4). Les contributions des gouttelettes sont distribuées au sein de chaque cellule du maillage Eulérien.

Les trois termes sources $\dot{m}$, $\dot{\mathbf{v}}$, $\dot{e}$ apparaissant dans les équations Eulériennes (1.46-1.49) s'écrivent donc :

$$\dot{m}^{(n)} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k -\alpha_k^{(n)} \frac{dm_k}{dt} \quad (1.51)$$

où $\sum_k$ est la somme sur chaque goutte affectant le noeud Eulérien n considéré. $\alpha_k^{(n)}$ représente le coefficient de répartition du terme source de la goutte k sur le noeud n . Si l'on considère tous les noeuds affectés par la goutte k , il est nécessaire d'avoir $\sum_n \alpha_k^{(n)} = 1$ pour conserver la masse, le moment et l'énergie lors de la répartition Lagrangienne/Eulérienne. Les valeurs de $\alpha_k^{(n)}$ sont alors les distances normalisées entre les gouttes et tous les noeuds environnant. m_k est la masse de la goutte k dans le voisinage du noeud. La masse est définie par la relation

$m_k = \rho_d \pi a_k^3 / 6$ et d'après les équations des gouttes 1.41 et 1.51 :

$$\dot{m}^{(n)} = \rho_d \frac{\pi}{4} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k \alpha_k^{(n)} a_k^3 / \beta_k^{(a)} \quad (1.52)$$

Avec un raisonnement similaire, le terme source du moment est défini par la relation :

$$\dot{\mathbf{v}}^{(n)} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k -\alpha_k^{(n)} \frac{dm_k \mathbf{V}_k}{dt} ,$$

ce qui nous donne finalement :

$$\dot{\mathbf{v}}^{(n)} = -\rho_d \frac{\pi}{4} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k \alpha_k^{(n)} a_k^3 \left(\frac{2}{3} \frac{\mathbf{U}(\mathbf{X}_d, t) - \mathbf{V}_k}{\beta_k^{(V)}} - \frac{\mathbf{V}_k}{\beta_k^{(a)}} \right) . \quad (1.53)$$

La variation de l'énergie de l'écoulement gazeux induite par les gouttes à l'intérieur du volume $\mathcal{V}$ est défini par :

$$\dot{e}^{(n)} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k -\alpha_k^{(n)} \frac{dm_k C_{pd} T_k}{dt} ,$$

soit,

$$\dot{e}^{(n)} = -C_{pd} \rho_d \frac{\pi}{4} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k \alpha_k^{(n)} a_k^3 \left(\frac{2}{3} \frac{T(\mathbf{X}_d, t) - T_k - B_k L_v / C_p}{\beta_k^{(T)}} + \frac{T_k}{\beta_k^{(a)}} \right) . \quad (1.54)$$

Les propriétés du gaz (viscosité μ , densité ρ et vitesse U_i) sont obtenues au niveau de la position de chaque goutte par un algorithme d'interpolation d'ordre 3 (Guichard et al. [29]) car la goutte ne se trouve pas sur un nœud mais à l'intérieur d'une maille composée de huit nœuds.

1.4 Schémas et conditions limites

Un schéma de type Runge Kutta d'ordre 3 avec une méthode de stockage minimal [80] est utilisé pour l'intégration en temps. Les dérivées spatiales sont issues d'un schéma de type PADE qui est d'ordre 6 en espace [40]. Les conditions aux limites sont gérées par la méthode NSCBC (Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition) développée par Poinot et Lele [52], Cette méthode se base sur une estimation monodimensionnelle des ondes caractéristiques traversant les frontières du domaine. En fait, une décomposition entre les ondes tangentiellles et normales aux surfaces est effectuée ([58]).

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons tout d'abord présenté les équations de la phase dispersée, avec notamment la description de trois modèles d'évaporation et des équations de transport et de la température des gouttes. Les équations utilisées pour la description de la phase dispersée ont été détaillées, ainsi que le couplage Eulérien/Lagrangien.

Chapitre 2

Chimie

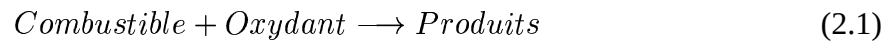
Dans les équations présentées dans le chapitre précédent, des termes sources chimiques apparaissent dans le cas d'un écoulement réactif, c'est-à-dire si les propriétés locales de l'écoulement sont réunies pour que les différentes espèces chimiques présentes réagissent. Notre problème est de modéliser le mieux possible ces réactions.

Considérons le cas de l'injection de deux écoulements gazeux initialement séparés. Les deux scénarios possibles sont présentés planche P2.1. Dans le premier cas, si la réaction a lieu avant le mélange entre le combustible et l'oxydant, alors une flamme de diffusion se met en place. Dans le second cas, si le combustible et l'oxydant se mélangent avant l'allumage, une flamme prémélangée se propage dans le domaine. Ces deux flammes (diffusion et prémélange) sont totalement différentes, tant du point de vue de leur structure et de leurs effets, que dans leurs description.

D'un point de vue numérique, diverses méthodes existent pour modéliser les réactions entre le combustible et l'oxydant. La cinétique complète prend en compte toutes les réactions de toutes les espèces chimiques ainsi que celles des espèces intermédiaires. Par exemple, pour un simple hydrocarbure, cela représente environ plusieurs centaines de réactions et plusieurs douzaines d'espèces chimiques. Les coûts de calcul sont alors importants et les résultats incertains car il est parfois difficile d'estimer certains coefficients de réactions très rapides ou d'espèces très rares. La chimie complexe avec des espèces intermédiaires est donc généralement modélisée sous la forme de cinétiques réduites. Pour cela, deux méthodes peuvent être utilisées : soit la cinétique complète est réduite à quelques réactions et espèces et des priorités

sont définies, soit des bases de données issues de cinétiques complexes sont générées et le modèle chimique s'y réfère en s'accordant sur quelques paramètres de référence (température, fraction de mélange, fraction massiques des espèces principales, etc). Ces méthodes donnent généralement de bons résultats mais sont complexes à mettre en œuvre et particulièrement coûteuse en temps.

Une cinétique chimique détaillée n'est pas forcément obligatoire dans les simulations numériques. Souvent, nous voulons seulement estimer l'effet global de la présence de la flamme dans l'écoulement sans pour autant connaître en détail les réactions. Dans le cadre de ce travail, une cinétique globale a donc été utilisée. Dans ce cas, la cinétique chimique est réduite à une unique réaction chimique irréversible à une étape :



Si le modèle de flamme capture les propriétés basiques des flammes réelles, alors les principaux effets de la combustion d'un écoulement gazeux sont pris en compte. Il est possible d'établir une liste de ces propriétés, certaines d'entre elles étant dédiées au régime prémélangé, les autres au régime de diffusion :

1. **Dégagement de chaleur issu de la combustion** : Il permet la dilatation du gaz et détermine la température de flamme.
2. **Vitesse de flamme** : Elle prend en compte une propagation de flamme réaliste correspondant à la richesse de combustible.
3. **Epaisseur de flamme** : Elle estime l'échelle des tourbillons capables de traverser le front de flamme dans les études sur les interactions combustion/turbulence et donc le plissement de la flamme et la vitesse turbulente.
4. **Limite d'extinction** : Il faut être capable d'établir l'extinction locale de la flamme due à la dissipation locale.
5. **Hauteurs de décollement, longueur de flamme** : Ces paramètres sont utiles pour la description de la structure globale de la flamme et de ses propriétés.
6. **Temps d'allumage** : Celui-ci nous permet de capturer les délais entre l'apport d'énergie et l'allumage de la flamme.

2.1 Modèles de base

Le modèle le plus basique pour la cinétique globale est dédié à la combustion non-prémélangée. Celui-ci considère une réaction infiniment rapide entre le combustible et l'oxydant. Ces derniers réagissent instantanément quand ils se rencontrent et la flamme est alors contrôlée par le mélange. Seul, le dégagement de chaleur est capturé par ce modèle et ce, uniquement pour de grands nombres de Damköhler. Cependant, même si les propriétés globales et le comportement de la flamme sont faux, cette méthode simple et instantanée peut être utile car elle peut être considérée comme une procédure de développement afin de tester la capacité des modèles numériques et physiques à réagir face au dégagement de chaleur de la combustion et à la dilatation des gaz.

La loi d'Arrhenius qui est couramment utilisée pour décrire la cinétique globale est capable de capturer la plupart des propriétés présentées. Cependant, comme il sera vu plus tard, des problèmes apparaissent pour obtenir des coefficients réalistes. Ce chapitre propose donc une modification de la partie préexponentielle de la loi d'Arrhenius, prenant en compte un nombre significatif de propriétés fondamentales ainsi que des phénomènes résultant de la combustion. Cette méthode peut être utilisée pour tous les rapports stoechiométriques entre le combustible et l'oxydant sans aucun des problèmes numériques rencontrés avec les méthodes standards. De plus, cela permet un calcul de la vitesse et de l'épaisseur de flamme, de son dégagement de chaleur et de ses limites d'extinction et ce, pour n'importe quelle valeur du rapport d'équivalence global ou local. Cette méthode est appelée GKAS (pour Global Kinetics, Any Stoichiometry).

Dans ce chapitre, les paramètres basiques de la combustion sont tout d'abord définis avant une présentation de la loi d'Arrhenius classique. Ensuite, une nouvelle loi est proposée avant de mettre en évidence la nécessité d'une définition précise de la vitesse de flamme laminaire pour n'importe quel rapport d'équivalence local.

2.2 Espace des phases et Loi d'Arrhenius

L'évolution d'un système chimique est généralement décrit par la quantité de combustible et d'oxydant présents dans le domaine. Dans cette section, nous suggérons de rajouter à cette représentation conventionnelle un nouvel espace des phases basé sur le rapport d'équivalence

et le taux d'avancement de chaque réaction. L'observation des paramètres usuels (fraction de mélange, taux de réaction ...) permet de comprendre les difficultés rencontrées avec la cinétique globale et propose de nouvelles solutions.

2.2.1 Définitions

Comme cela a été mentionné précédemment, nous considérons deux écoulements gazeux initialement séparés, injectés dans le même domaine (planche. P2.1.). Le premier écoulement est un gaz de combustible de fraction massique $Y_F^* = 1$ contenant du combustible pur ou dilué. Le facteur de dilution est donné par $Y_{F,0}$ qui vaut 1 si Y_F^* est du combustible pur. $Y_{F,0}$ correspond à la fraction massique effective de combustible dans l'écoulement Y_F^* . De même, le second écoulement est un jet d'oxydant tel que $Y_O^* = 1$ à l'injection, avec $Y_{O,0}$ la fraction massique effective d'oxydant. Plus généralement, les fractions massiques de combustible et d'oxydant initiaux effectifs peuvent être écrits $Y_F = Y_{F,0} * Y_F^* = 1$ et $Y_O = Y_{O,0} * Y_O^* = 1$.

La réaction entre le combustible et l'oxydant est souvent décrite par une cinétique à une étape :



où Y_F, Y_O et Y_P sont respectivement les fractions massiques de combustible, d'oxydant et de produit. Les coefficients molaires stoechiométriques correspondant sont ν_F, ν_O et ν_P . Le taux de réaction général est noté $\dot{\omega}_r$ et les évolutions des fractions massiques et de l'énergie sont décrites par les équations ci-dessous, écrites pour une réaction en un point :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} = -\nu_F W_F \dot{\omega}_r, \quad \frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} = -\nu_O W_O \dot{\omega}_r, \quad \frac{\partial \rho T}{\partial t} = \frac{q_0}{C_p} \nu_F W_F \dot{\omega}_r \quad . \quad (2.3)$$

W_F and W_O sont les masses moléculaires du combustible et de l'oxydant et q_0 est l'énergie libérée par unité de masse de combustible. C_p est la chaleur spécifique. De plus, en définissant le coefficient stoechiométrique massique par $s = \nu_O W_O / \nu_F W_F$ cela nous permet d'introduire la variable de Schwab-Zeldovitch $\varphi = Y_F - Y_O/s$ qui peut être normalisée par les valeurs extrêmes des jets de combustible et d'oxydant purs. La fraction de mélange Z peut alors en être déduite de sorte que $Z = 0$ dans le jet d'oxydant et $Z = 1$ dans le jet de combustible. Si

nous définissons le rapport stoechiométrique constant $\Phi_s = sY_{F,0}/Y_{O,0}$, alors l'expression de la fraction de mélange peut être écrite :

$$Z = \frac{\Phi_s \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{1 + \Phi_s} \quad (2.4)$$

Cette dernière équation, réécrite en terme de fraction massique des écoulements de combustible et d'oxydant donne :

$$Z = \frac{\Phi_s Y_F^* - Y_O^* + 1}{1 + \Phi_s} \quad (2.5)$$

et nous permet de définir le rapport d'équivalence Φ par :

$$\Phi = \Phi_s \frac{Z}{1 - Z} = \Phi_s \frac{\Phi_s Y_F^* - Y_O^* + 1}{\Phi_s (1 - Y_F^*) + Y_O^*} \quad (2.6)$$

Il est possible de tracer les isolignes Φ et Z dans l'espace $\mathbf{Y}^*(Y_F^*, Y_O^*)$. Il apparait d'après les relations 2.5 et 2.6, que ces lignes ont la même pente, égale à Φ_s (cf planche P2.2.). En effet, on peut écrire l'égalité suivante :

$$Y_O^* = \Phi_s Y_F^* + (1 - Z(\Phi_s + 1)) = \Phi_s Y_F^* + \Phi_s \frac{1 - \Phi}{\Phi_s + \Phi} \quad (2.7)$$

Le rapport d'équivalence Φ (et donc la fraction de mélange Z) à travers une flamme prémélangée est toujours constant. Par conséquent, dans ce régime, les espèces évoluent dans la limite d'une isoligne Φ donnée et toujours dans la même direction (cf planche P2.2.b). On peut également définir un dernier paramètre nous permettant de marquer la progression le long des isolignes Φ . En effet, il est possible de suivre l'isoligne de la variable de présence $p = Y_F^* + Y_O^*$, qui est égale à 1 dans un mélange pur de combustible et d'oxydant et qui ensuite diminue (jusqu'à 0 dans le cas d'un mélange stoechiométrique) quand le combustible et l'oxydant sont brûlés (planche P2.2.).

La variable de progrès c le long de l'isoligne Φ (ou isoligne Z) est définie par la variable normalisée p en utilisant sa valeur maximale $p = 1$ (i.e. $c = 0$) le long de la ligne de mélange et sa valeur minimale lorsque le combustible et l'oxydant disparaissent ($Y_F^* = 0$ ou $Y_O^* = 0$ conduisant à $c = 1$). Ainsi, c est définie par :

$$c = \begin{cases} -\frac{Y_F^* + Y_O^* - 1}{\Phi_s Y_F^* - Y_O^* + 1} & \text{si } \Phi \leq 1 \text{ côté pauvre} \\ -\Phi_s \frac{Y_F^* + Y_O^* - 1}{\Phi_s Y_F^* - Y_O^* + \Phi_s} & \text{si } \Phi > 1 \text{ côté riche} \end{cases} \quad (2.8)$$

Généralement, plusieurs espaces des phases sont utilisés en fonction des régimes de combustion étudiés. En effet, les flammes de diffusion sont généralement représentées dans l'espace de la fraction de mélange/fraction massique, tandis que la propagation des flammes prémélangées est déterminée par la direction de la variable de progrès c . Cependant, pour la combustion partiellement prémélangée, suivre la structure de la flamme est relativement difficile avec ces représentations (cf planche P2.3.).

La trajectoire dans l'espace des phases de deux échantillons de fluide, le premier ($\mathcal{P}_F$) appartenant à l'écoulement de combustible et le second ($\mathcal{P}_O$) issu de l'écoulement d'oxydant peut varier très différemment suivant les trois régimes possibles de combustion (prémélangé, non-prémélangé et partiellement prémélangé). La planche P2.3. montre un exemple de ces évolutions. En effet, nous pouvons voir, dans le cas du régime prémélangé que $\mathcal{P}_F$ est mélangé avec $\mathcal{P}_O$ avant de brûler alors que dans le cas du régime non-prémélangé, $\mathcal{P}_F$ et $\mathcal{P}_O$ ne se mélangent pas avant que la combustion n'ait lieu. De plus, dans le cas du régime partiellement prémélangé, nous remarquons que les deux comportements observés ci-dessus sont présents en même temps.

2.2.2 Loi d'Arrhenius

De nombreuses études numériques et analytiques ont été dédiées à la détermination d'une loi précise pour le taux de réaction. Une description détaillée de cette loi peut être trouvée dans [53] et dans les références ci-dessous. Bien que quelques auteurs utilisent la fonction d'Heaviside pour simplifier le calcul du taux de réaction, il semble naturel d'étendre la loi exponentielle d'Arrhenius à une cinétique chimique simple et spécialement aux cinétiques à une étape. La loi d'Arrhenius est basée sur le produit entre une fonction exponentielle et une fonction préexponentielle. D'après les notations décrites précédemment, on obtient :

$$\dot{\omega}_r = K \rho^{n_p} Y_F^{*n_F} Y_O^{*n_O} \exp(-T_a/T) \quad , \quad (2.9)$$

avec K un facteur préexponentiel constant. Il est possible d'exprimer le terme exponentiel de façon plus pratique en introduisant le coefficient du taux de dégagement de chaleur α et le coefficient β permettant de mesurer la température d'activation T_a . En définissant T_u la température des gaz frais et T_b la température des gaz brûlés dans le cas de la combustion d'un mélange

stoéchiométrique, α et β deviennent :

$$\alpha = \frac{T_b - T_u}{T_b} \quad \text{et} \quad \beta = \alpha \frac{T_a}{T_b} . \quad (2.10)$$

En introduisant, la température de référence des gaz frais T_u dans la relation 2.9, la loi d'Arrhenius peut être exprimée en fonction de α et β :

$$\dot{\omega}_r = K \rho^{n_\rho} Y_F^{*n_F} Y_O^{*n_O} \exp \left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\beta}{\alpha(1-\alpha)} \frac{T_u}{T} \right) , \quad (2.11)$$

où le terme $\exp(-\beta/\alpha)$ a été inclu dans la constante K afin d'équilibrer l'ordre de grandeur des différents termes. Les exposants de la réaction n_F et n_O ne sont pas nécessairement égaux à ν_F et ν_O et n_ρ vaut généralement $n_\rho = n_F + n_O$. Pour les simulations présentées dans ce travail, les valeurs classiques $\alpha = 0.8$ et $\beta = 8.0$ ont été utilisées. Cette équation (eq. 2.11) permet de modéliser la cinétique d'une réaction à une étape. Cependant, un certain nombre de restrictions physiques ou numériques peuvent apparaître. Comme le montrent Poinot et Veynante [53], en prenant les exposants de la réaction n_F et n_O égaux à 1, les estimations numériques et asymptotiques de la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence donnent de bonnes estimations pour le côté pauvre ($\Phi < 1$) mais échouent du côté riche ($\Phi > 1$). En fait, une augmentation constante de la vitesse est observée même pour les rapports d'équivalence plus grand que 1 alors qu'elle devrait atteindre sa valeur maximale au voisinage de $\Phi = 1$. Ce problème est lié à la fonction préexponentielle définie dans l'espace des Y^* par

$$P_e(Y_F, Y_O, n_F, n_O) = Y_F^{*n_F} Y_O^{*n_O} \quad (2.12)$$

ou par

$$P_e(\Phi, p, n_F, n_O) = \left(\frac{\Phi_s(p-1) + \Phi(p + \Phi_s)}{\Phi\Phi_s + \Phi_s^2 + \Phi_s + \Phi} \right)^{n_F} \left(\Phi_s \frac{\Phi_s p + \Phi(p-1) + 1}{\Phi\Phi_s + \Phi_s^2 + \Phi_s + \Phi} \right)^{n_O} \quad (2.13)$$

dans le système de coordonnées du coefficient de présence $p = Y_F^* + Y_O^*$ et du rapport d'équivalence Φ défini par l'équation 2.6 (planche P2.2.). En regardant la valeur maximale de la fonction préexponentielle P_e pour différents rapports d'équivalence le long des isolignes p ($\partial P_e / \partial \Phi = 0$), il est possible de montrer que n_F et n_O sont liés par la relation :

$$\frac{n_O}{n_F} = \Phi_s \frac{\Phi_s p + \Phi(p-1) + 1}{\Phi_s(p-1) + \Phi(p + \Phi_s)} . \quad (2.14)$$

Ainsi, pour avoir la valeur maximale de la fonction préexponentielle P_e pour un mélange stoechiométrique $\Phi_s = 1$, le rapport suivant doit être imposé :

$$\frac{n_O}{n_F} = \Phi_s \quad . \quad (2.15)$$

Un nouveau problème apparaît, pour la combustion de combustibles classiques (méthane, propane, hydrocarbure, . . .) avec de l'air, le coefficient stoechiométrique est souvent supérieur à 10. Dans ce dernier cas, où $\frac{n_O}{n_F} = 15$, les exposants entre 0.0625 et 15 apparaissent dans la fonction préexponentielle.

Pour des études analytiques basées sur l'analyse du dégagement de chaleur, ce problème peut être résolu en travaillant avec une combustion non réaliste telle que $\Phi_s = 1$. Dans ce cas, n_O/n_F est égal à l'unité et la valeur maximale de la vitesse de flamme est trouvée pour $\Phi = 1$. Cependant, même dans des cas simplifiés, un second problème persiste. Les expériences ont montré que la vitesse de flamme exprimée en fonction du rapport d'équivalence est presque symétrique autour de sa valeur maximale. Mais l'estimation numérique de cette courbe pour $\Phi_s = 1$ montre une asymétrie importante. Cela est dû au fait que la quantité de combustible brûlé en fonction du rapport d'équivalence n'est pas symétrique autour de $\Phi = 1$. Par conséquent, le dégagement de chaleur et la vitesse de flamme sont plus importants du côté riche.

Dès lors, la nouvelle méthode doit outrepasser deux problèmes majeurs : premièrement, la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence doit être maximale au voisinage de $\Phi = 1$. Deuxièmement, la forme générale de la courbe (courbe en cloche, BSC pour Bell Shape Curve) doit être quasi-symétrique. Il est montré à la fin de ce chapitre que la courbure de la courbe BSC autour de la valeur maximale est de première importance pour la combustion partiellement prémélangée. Ainsi, la méthode développée s'est focalisée sur la possibilité de caler le modèle numérique sur n'importe quelle courbe de vitesse expérimentale.

2.3 Méthode GKAS

La procédure de la méthode GKAS peut être divisée en deux parties :

recallage (ou 'remapping') : Cette première étape consiste à modifier l'expression du facteur préexponentiel de sorte que la nouvelle fonction ait sa valeur maximale en $\Phi = 1$, et ce,

quelle que soit la valeur de Φ_s . Ce facteur préexponentiel va donner la forme générale de la courbe BSC.

scaling : Un facteur correctif dépendant de la fraction de mélange Φ est ajouté à la loi d'Arrhenius tel que la courbe numérique BSC corresponde à la courbe expérimentale.

2.3.1 Remapping

Il a été vu précédemment que travailler avec la fonction préexponentielle tel que $\Phi_s = 1$ conduit au rapport $n_O/n_F = 1$ et par conséquent à l'expression suivante :

$$P_e(Y_F^*, Y_O^*, n) = Y_F^{*n} Y_O^{*n} \quad (2.16)$$

avec n un exposant commun. La fonction préexponentielle est numériquement stable et rapide spécialement si $n = 1$. Cependant, notre objectif est de travailler avec de plus grandes valeurs de Φ_s . Nous suggérons donc de projeter les résultats de la fonction stable $P_e(Y_F^*, Y_O^*) = Y_F^* Y_O^*$ définie par $\Phi_s = 1$ pour tout $\Phi_s \gg 1$ de l'espace des phases comme indiqué sur la figure 2.1. Plusieurs procédures sont possibles, et nous choisissons la procédure GKAS qui apparaît être la plus rapide sans aucun test sur la richesse de l'écoulement.

Tout d'abord, les fractions massiques projetées ou mappées Y_F^M et Y_O^M doivent être définies telle que la nouvelle fonction préexponentielle P_e^M pour $\Phi_s \gg 1$ s'écrive :

$$P_e^M = Y_F^M Y_O^M \quad (2.17)$$

Pour trouver la fonction de transformation entre (Y_F^*, Y_O^*) et (Y_F^M, Y_O^M) , un nouveau changement de coordonnées doit être fait. En premier lieu, nous devons définir le facteur de pente ζ^* des lignes $\mathcal{L}(Y_F^*, Y_O^*)$ dont l'origine dans l'espace des phases est situé en $Y_F = Y_O = 0$ et incluant toutes les coordonnées (Y_F^*, Y_O^*) données (cf planche P2.4.a). Nous avons alors la relation :

$$\frac{Y_O^*}{Y_F^*} = \frac{\Phi_s}{\zeta^*} \quad (2.18)$$

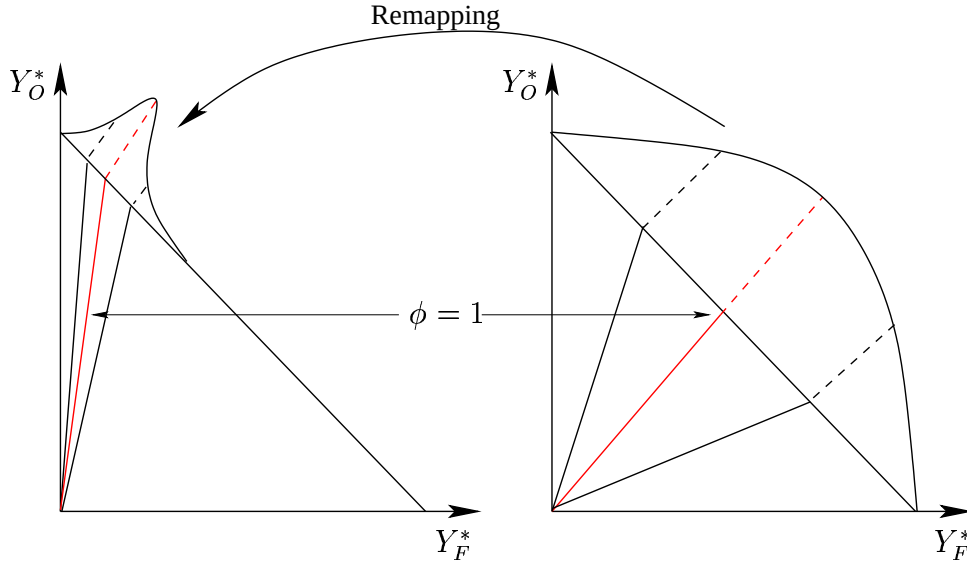


FIG. 2.1 – Scénario d’une procédure de ‘remapping’ purement géométrique. Les valeurs du facteur préexponentiel calculable ($Y_F^* Y_O^*$) à droite sont recalculées à partir de la configuration instable ($Y_F^{*n_F} Y_O^{*n_O}$) à gauche. Le paramètre de référence est l’angle Φ_s de l’isoligne $\Phi = 1$ avec l’horizontale : $\Phi_s = 1$ à droite et Φ_s peut prendre n’importe quelle valeur à gauche (généralement $\Phi_s > 10$).

La ligne de référence étant définie par un angle Φ_s , ζ^* nous donne le rapport entre la pente de cette ligne et de celle de toutes les lignes $\mathcal{L}(Y_F^*, Y_O^*)$. Cependant, le remapping doit préserver ce facteur, donc $\zeta^* = \zeta^M$ et $\zeta^M = Y_F^M / Y_O^M$. Nous obtenons donc une première relation :

$$\frac{Y_F^M}{Y_O^M} = \Phi_s \frac{Y_F^*}{Y_O^*} \quad (2.19)$$

Cela induit une projection des valeurs de la fonction P_e^M sur le champ défini par Y_F^* et Y_O^* . Cette projection a besoin d’un dernier paramètre de contrôle. La relation ci-dessus (eq. 2.19) donne l’angle de la ligne dans l’espace (Y_F^*, Y_O^*) où les valeurs de (Y_F^M, Y_O^M) sont mappées. Chaque point de cette ligne peut être défini par sa distance à l’origine représentée par la paramètre de présence p . Cette distance doit rester constante dans les deux systèmes de coordonnées. D’où

$$Y_F^M + Y_O^M = Y_F^* + Y_O^* \quad (2.20)$$

est la seconde relation nous permettant de définir les deux fractions massiques mappées Y_F^M, Y_O^M

comme des fonctions de Y_F^* , Y_O^* et de Φ_s :

$$Y_F^M = Y_F^* \frac{\Phi_s (Y_F^* + Y_O^*)}{\Phi_s Y_F^* + Y_O^*} \quad (2.21)$$

$$Y_O^M = Y_O^* \frac{(Y_F^* + Y_O^*)}{\Phi_s Y_F^* + Y_O^*} \quad (2.22)$$

La nouvelle fonction préexponentielle peut alors être écrite :

$$P_e^M = Y_F^* Y_O^* \frac{\Phi_s (Y_F^* + Y_O^*)^2}{(\Phi_s Y_F^* + Y_O^*)^2} \quad (2.23)$$

Comme indiqué sur la planche P2.4.a, la méthode générale consiste à projeter les valeurs de la fonction préexponentielle définie pour $\Phi_s = 1$ sur n'importe quelle fonction préexponentielle Φ_s . La projection générale de la fonction peut être vue planche P2.4.b. Cette procédure nous permet d'imposer le comportement général de la courbe de la vitesse de flamme comme une fonction du rapport d'équivalence. Les difficultés numériques liées aux exposants ont été évitées et la vitesse de flamme atteint son maximum au voisinage de $\Phi = 1$. A présent, un facteur correctif doit être ajouté pour obtenir un bon comportement de la vitesse du côté pauvre et du côté riche de la courbe BSC.

2.3.2 Scaling

Si l'exposant initial a été choisi de telle sorte que $n_O/n_F = \Phi_s$ et $n_O + n_F = 1$, la nouvelle loi d'Arrhenius s'écrit :

$$\dot{\omega}_r = K(\Phi) \rho Y_F^* Y_O^* \frac{\Phi_s (Y_F^* + Y_O^*)^2}{(\Phi_s Y_F^* + Y_O^*)^2} \exp \left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\beta}{\alpha(1-\alpha)T} \right) \quad (2.24)$$

$K(\Phi)$ est le coefficient préexponentiel, qui est constant pour un rapport d'équivalence donné. Il nous permet d'ajuster la courbe BSC à la forme voulue.

La détermination du facteur préexponentiel peut être réalisée selon deux méthodes. Si la courbe BSC doit être déterminée de façon très précise, il est suggéré d'utiliser un code 1D permettant de calculer des flammes prémélangées stabilisées. Le coefficient $K(\Phi)$ peut alors être déterminé d'après la courbe BSC prescrite, qui nous donne la vitesse atteinte par la flamme pour tout rapport d'équivalence. Une seconde méthode, moins précise mais directe, consiste à déterminer $K(\Phi)$ comme une fonction générique avec quelques paramètres à ajuster.

Pour calculer des flammes prémélangées 1D laminaires, les équations de conservation classiques sont utilisées. Elles sont brièvement rappelées par la suite, mais pour plus de détails, le lecteur pourra se reporter à l'ouvrage de Poinso et Veynante [53]. Deux méthodes peuvent être utilisées pour résoudre les flammes 1D laminaires et stationnaires. Les deux sont issues des mêmes équations de conservation 1D des quantités suivantes :

– Masse

$$\rho_{,t} + (\rho u)_{,x} = 0 \quad (2.25)$$

– Moment

$$(\rho u)_{,t} + (\rho u^2)_{,x} = -p_{,x} + \left(\frac{4}{3} \mu u_{,x} \right)_{,x} \quad (2.26)$$

Il est à noter que dès que la flamme atteint un état stationnaire, ρu est constant à travers la flamme.

– Fractions massiques de combustible et d'oxydant : Y_i avec $i = F$ ou $i = O$.

$$(\rho Y_i^*)_{,t} + (\rho u Y_i^*)_{,x} = (\rho D(Y_i^*))_{,x} - \nu_i W_i \dot{\omega}_r \quad (2.27)$$

– Energie

$$(\rho C_p T)_{,t} + (\rho u C_p T)_{,x} = (\lambda T_{,x})_{,x} + q_0 \nu_F W_F \dot{\omega}_r + \rho C_p D Y_{,x} T_{,x} \quad (2.28)$$

La méthode, utilisée pour les simulations présentées dans ce travail, consiste à résoudre ces équations avec un solveur instationnaire (DNS-PADE). Une solution est atteinte dès qu'une évolution temporelle stationnaire des variables est atteinte. Un solveur de type Runge-Kutta du troisième ordre est utilisé pour l'intégration en temps, et les dérivées spatiales proviennent d'un schéma de type PADE du sixième ordre. Les conditions limites caractéristiques de Navier-Stokes [52] sont utilisées pour l'entrée et la sortie du domaine. Une transformation galiléenne est régulièrement appliquée sur le champ de vitesse pour que le front de flamme reste au centre du domaine de calcul.

Notre objectif est de déterminer, pour un rapport d'équivalence Φ donné, le coefficient préexponentiel K apparaissant dans l'expression (eq. 2.24) du taux de réaction $\dot{\omega}_r$. La vitesse

$S_l(\Phi)$ est directement réglée grâce à la courbe BSC prescrite. Les calculs prémélangés 1D sont très rapides. Ils permettent d'utiliser une recherche classique de racines pour déterminer la valeur de $K(\Phi)$ correspondant au $S_l(\Phi)$ déduit. Tout d'abord, une valeur maximum K^u et une valeur minimum K^l du coefficient préexponentiel sont déterminées de sorte que les vitesses de flamme correspondantes soient les limites de celle voulue : $S_l^l(K^u) < S_l(K(\Phi)) < S_l^u(K^l)$. Ensuite, en utilisant la méthode de Newton pour la recherche de racines [57], la valeur de $K(\Phi)$ correspondant à $S_l(\Phi)$ est trouvée.

Les effets d'un coefficient préexponentiel constant $K = K_0$ sont significatifs sur la courbe BSC. En effet, même si une valeur maximale est donnée pour un rapport d'équivalence Φ égal à 1, grâce à la méthode de remapping, la vitesse de réponse de la flamme est linéaire et asymétrique (planche P2.5.a, cercles blancs). L'évolution du côté pauvre de la courbe BSC est généralement déterminée correctement par la constant K . Cependant, les vitesses du côté riche sont fortement surestimées après le rapport d'équivalence $\Phi = 1$, même s'il y a une très nette amélioration par rapport à la loi d'Arrhenius classique. Il apparaît qu'en ajoutant une dépendance en Φ sur le facteur préexponentiel K , il est possible de jouer sur la forme de la courbe en cloche. Le coefficient sans dimension $K^+(\Phi) = K(\Phi)/K_1$, tel que $K_1 = K(\Phi = 1)$, est représenté planche P2.5.b selon la courbe BSC prescrite. La même vitesse de flamme stoechiométrique a été utilisée pour tous les calculs, donc K_1 est identique pour chaque courbe BSC. La planche P2.5.a montre l'évolution de la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence pour divers combustibles. Certaines de ces courbes sont obtenues numériquement ou expérimentalement mais avec une cinétique chimique complète. Par définition, notre méthode est capable de jouer sur la forme de la vitesse en fonction du rapport d'équivalence. En effet, c'est la condition de convergence de la méthode de Newton.

2.3.3 Processus d'allumage et d'extinction

Les deux phénomènes d'allumage et d'extinction sont aussi importants l'un que l'autre pour bien modéliser la combustion turbulente. L'allumage dépend directement de la production de radicaux et de l'importance de quelques cinétiques intermédiaires. Peters *et al.* [48] entre autres, ont décrit les caractéristiques d'allumage comme une fonction du régime de température. Ils ont montré que trois modes peuvent être identifiés : les régimes de températures bas, intermédiaire

et élevé. Si les deux régimes bas et élevé donnent généralement une variation linéaire du délais d'allumage avec une échelle logarithmique, le régime de température intermédiaire subit une variation soudaine de la pente (planche P2.6.). Ce phénomène est observé expérimentalement avec des cinétiques complètes ou réduites [48]. Ceci est principalement dû à un changement de priorité de quelques réactions intermédiaires qui conduit à une réduction de la production de radicaux. Mais ce phénomène ne peut pas être capturé par une chimie globale qui ne détermine pas l'évolution des espèces intermédiaires. Comme présenté sur la planche P2.6., les délais d'allumage obtenus par la méthode GKAS suivent une évolution régulière pour l'ensemble des régimes de température.

Ainsi, la procédure GKAS, comme toute cinétique globale, ne peut pas être utilisée pour déterminer les délais d'allumage pour les régimes de température intermédiaire et élevé. Ce résultat n'apporte rien mais confirme le fait évident que pour une étude spécifiquement reliée à la chimie du combustible, une description précise des cinétiques doit être utilisée. Rappelons qu'une cinétique globale n'est pas destinée à la description de la partie interne de la flamme mais à ses effets sur l'écoulement environnant et vice versa. En particulier, l'écoulement peut imposer à la flamme un fort étirement qui peut conduire à l'extinction. Il est très important de capturer précisément la limite d'extinction de la flamme. Par exemple, dans les études de la combustion turbulente, un des paramètres les plus importants est la variation locale de l'étirement qui conduit à la variation du dégagement de chaleur voir même à l'extinction de la flamme.

Une configuration à contre-courant 1D pour la combustion non-prémélangée a été utilisée pour déterminer le niveau d'extinction de la méthode GKAS. L'équation d'équilibre de la fraction massique de combustible (eq. 2.27) peut être réécrite en utilisant la structure de la flamme dans l'espace de Z ([53]):

$$\rho(Y_F^*)_{,t} + Y_F^*[\rho_{,t} + (\rho u_i)_{,x_i}] + (Y_F^*)_{,Z} \left[\rho Z_{,t} + \rho u_i Z_{,x_i} - (\rho D Z_{,x_i})_{,x_i} \right] = \rho D(Z_{,x_i} Z_{,x_i})(Y_F^*)_{,ZZ} - \nu_F W_F \dot{\omega}_r \quad (2.29)$$

Les deux termes entre crochets dans l'équation 2.29 disparaissent à cause des équations de continuité et de la fraction de mélange. Le taux de dissipation scalaire $\chi = 2D(Z_{,x_i} Z_{,x_i})$ peut

alors être introduit et on obtient la relation suivante :

$$\rho (Y_F^*)_{,t} = \frac{1}{2} \rho \chi (Y_F^*)_{,ZZ} - \nu_F W_F \dot{\omega}_r \quad (2.30)$$

La planche P2.7.a représente les courbes d'évolution du maximum de température et du taux de réaction normalisés en fonction de l'inverse du taux de dissipation scalaire normalisé, dans le cas du propane. Nous remarquons que la limite d'extinction du propane (qui correspond à un taux de réaction nul et une température faible) est relativement proche de sa valeur expérimentale qui se situe autour de 1. La procédure GKAS donne donc un bon comportement de la flamme en ce qui concerne le processus d'allumage et d'extinction de la flamme.

2.4 Influence de la courbe en cloche

Jusqu'à présent, nous nous sommes intéressés aux flammes prémélangées pour développer la nouvelle fonction préexponentielle de la loi d'Arrhenius. Cependant, comme on peut le voir sur la planche P2.1., le mélange et la combustion du combustible et de l'oxydant peuvent suivre différents scénarios. Dans la plupart des configurations industrielles, la combustion partiellement prémélangée est rencontrée. Même pour un brûleur non-prémélangé, la hauteur de décollement de la flamme est déterminée par un noyau prémélangé brûlant à un régime stoechiométrique. Une longue flamme de diffusion émerge de ce front de flamme prémélangée au niveau de l'interface combustible-oxydant. Suivant les conditions locales de mélange et de gradient dans le front de flamme, le noyau est soit une extrémité de flamme, soit une flamme triple. Ces flammes sont maintenant bien connues et il a été montré que leur structure a une très grande influence sur le mécanisme de stabilisation de la flamme [6, 66, 75]. Les flammes triples sont composées de trois branches émergeant d'une zone prémélangée brûlant à la stoechiométrie : une flamme de prémélange pauvre, une flamme de prémélange riche et une flamme de diffusion. Le front de flamme partiellement prémélangé détermine les caractéristiques de propagation et de stabilisation de la flamme. En effet, suivant le dégagement de chaleur le long de ce front de flamme, la déviation de l'écoulement de gaz frais due à la propagation de la flamme peut varier. Dans ce cas, la vitesse de flamme relative comparée à celle des gaz frais est affectée. Dans cette dernière partie, des tests sont donc effectués pour démontrer qu'il est très important d'utiliser une courbe BSC précise pour le mécanisme de stabilisation de la flamme.

Une configuration de type double-wake (planche P2.7.b) a été choisie. Le combustible est injecté dans la partie centrale et l'oxydant est injecté de chaque côté du domaine. Même si la configuration est symétrique, des simulations bidimensionnelles de cette configuration doivent être effectuées. Tout d'abord, la simulation d'un écoulement à froid est réalisée avant l'allumage du mélange à la fin du domaine avec une hypothèse d'équilibre chimique. Ensuite, le front de flamme se propage à l'intérieur du domaine jusqu'à atteindre ses paramètres de stabilisation idéaux (gradient de fraction de mélange, mélange stoechiométrique et vitesse d'écoulement). Cinq simulations ont été effectuées et un seul paramètre était variable : $K(\phi)$. La courbe BSC correspondante a été sélectionnée parmi les cinq courbes proposées dans la planche P2.5.a. Le point le plus important à noter est que la vitesse de flamme prémélangée laminaire stoechiométrique est strictement la même dans les cinq cas. Seule la forme de cette vitesse autour de $\phi = 1$ est variable.

Une fois que la flamme est stabilisée, la hauteur d'accrochage de la flamme et la forme de la flamme peuvent être extraites. Les effets de la courbe BSC sur la stabilisation de la flamme sont très importants. Le tableau 2.1 montre les hauteurs d'accrochage de la flamme suivant les diverses courbes BSC. Si la courbe BSC qui est symétrique analytiquement, est choisie comme courbe de référence ($h_{lo} = 1$), une grande variation d'amplitude pour la hauteur peut être observée : $0.62 \leq h_{lo} \leq 1.16$. Il y a plus de 50% de variation pour les hauteurs d'accrochage entre les courbes BSC de méthane et d'éthyne. Il apparaît que ces hauteurs dépendent directement de l'épaisseur des courbes BSC autour du rapport d'équivalence unitaire. Plus la courbe BSC est large, plus le front de flamme partiellement prémélangé est large. Par conséquent, la déviation de l'écoulement autour du front de flamme est plus importante et la flamme se propage plus rapidement ou, dans notre cas, est plus près du brûleur. Les formes des fronts de flammes stabilisées sont détaillées planche P2.8. Ces figures montrent l'effet important de la courbe BSC sur l'épaisseur du front partiellement prémélangé. Il a été montré que les propriétés des branches prémélangées dépendent du gradient de la fraction de mélange dans le front de flamme [5]. C'est donc une condition dépendant de la géométrie. Une autre condition relative à la chimie, concerne la courbe BSC qui ne varie pas pour un combustible donné. Cependant, quand on étudie la combustion partiellement prémélangée, il est très important d'avoir une description précise de la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence aussi bien du côté pauvre

BSC	Analytique	Methane	Ethyne	Propane	K = cte
h/h_{ana}	1	1.16	0.62	1.06	0.69

TAB. 2.1 – Distance relative entre l’injection de combustible et les flammes laminaires stabilisées pour diverses courbes en cloche. La vitesse de flamme prémélangée stoechiométrique 1D est identique dans les cinq cas.

que du côté riche.

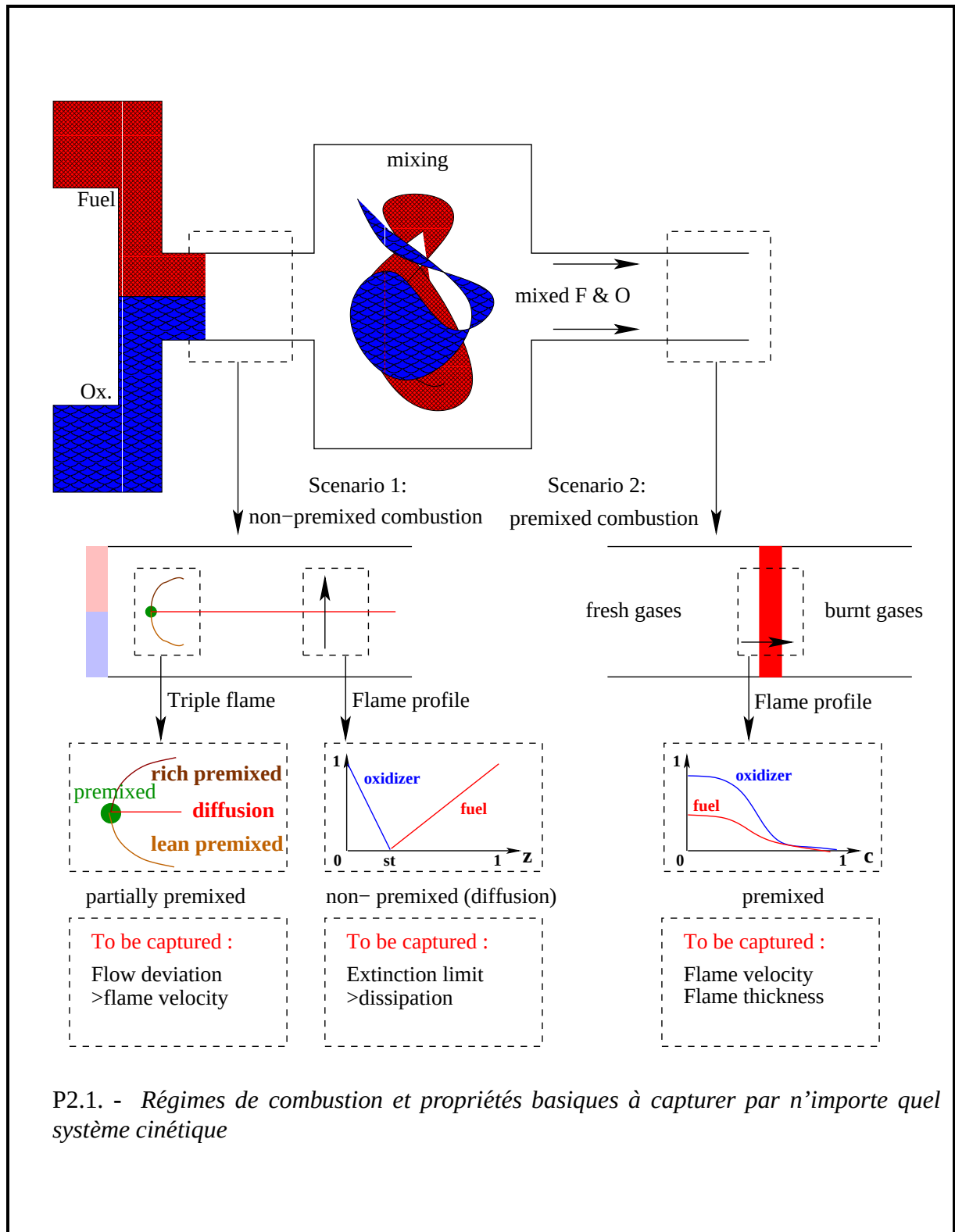
2.5 Conclusion

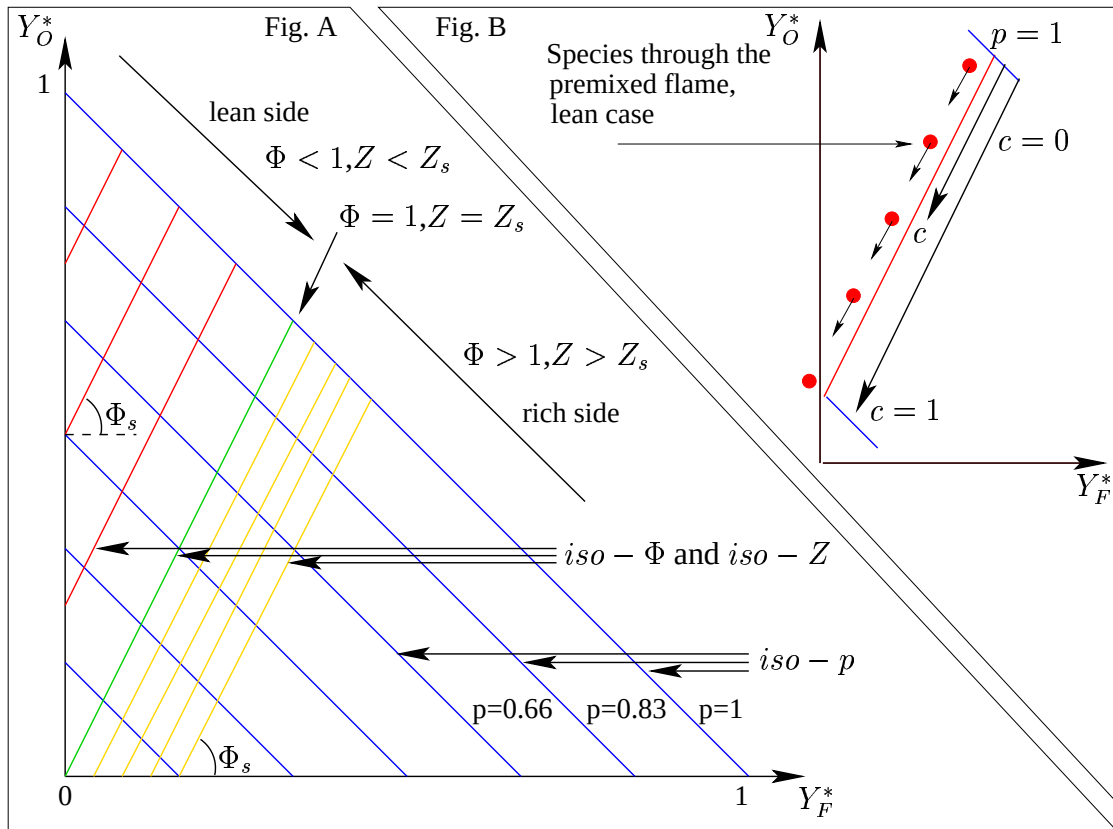
En utilisant une cinétique globale pour décrire les phénomènes de combustion, nous n’avions pas l’intention d’étudier la physique du noyau de la flamme mais plutôt les effets de la flamme et du dégagement de chaleur sur l’écoulement environnant. Pour cela, les propriétés de la flamme doivent être précisément représentées. Cependant, en étudiant, dans la littérature, les possibilités offertes par une cinétique chimique simple impliquant une loi d’Arrhenius, nous nous apercevons qu’un mélange partiellement prémélangé ou prémélangé riche n’est pas correctement modélisé par une loi d’Arrhenius globale classique. De plus, pour obtenir un rapport stoechiométrique réaliste entre le combustible et l’oxydant, des difficultés numériques peuvent apparaître.

Par conséquent, une loi d’Arrhenius modifiée est proposée pour respecter certaines conditions. La nouvelle loi peut être utilisée pour n’importe quel rapport stoechiométrique sans aucune difficulté numérique et l’évolution de la vitesse de flamme en fonction du rapport d’équivalence peut être exactement déduite d’une courbe expérimentale ou d’un résultat numérique provenant d’une simulation avec une chimie complexe. Il a été montré que le comportement de la flamme près de la limite d’extinction est bien représenté par la nouvelle loi d’Arrhenius. Cependant, comme pour toute cinétique globale, le délai d’allumage qui dépend de la température ne peut pas être capturé.

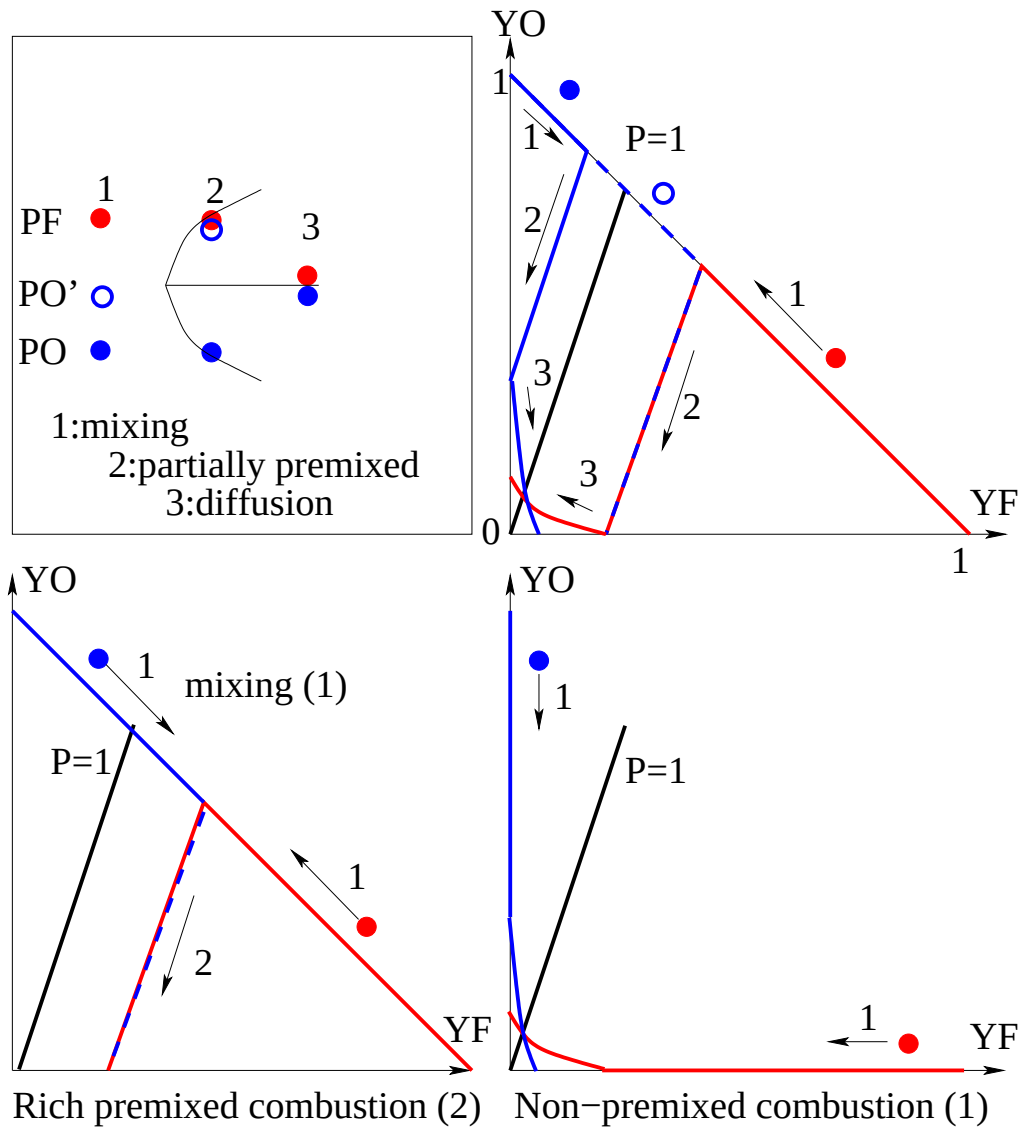
Il a également été montré qu’avec une nouvelle fonction préexponentielle et un coefficient préexponentiel contrôlé, il est possible de déduire n’importe quelle courbe en cloche d’après la vitesse de flamme qui dépend du rapport d’équivalence. Comme première application, la stabilisation d’une flamme dans un double-wake a été réalisée pour différentes formes de courbes de

vitesse de flamme autour d'une valeur stoechiométrique identique. Des effets importants ont été observés, suggérant qu'il faut, dans le cas de la combustion partiellement prémélangée prendre en compte des courbes en cloche réalistes.

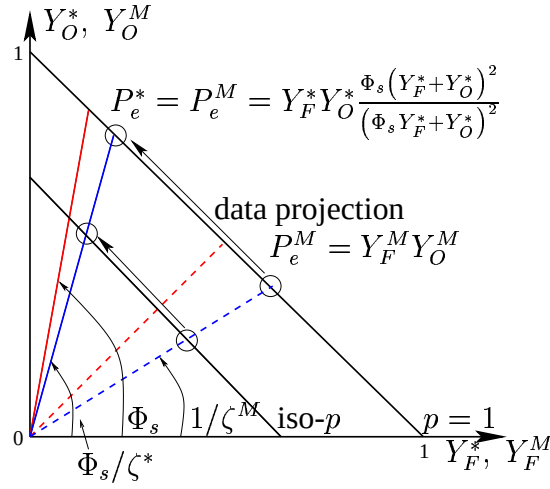




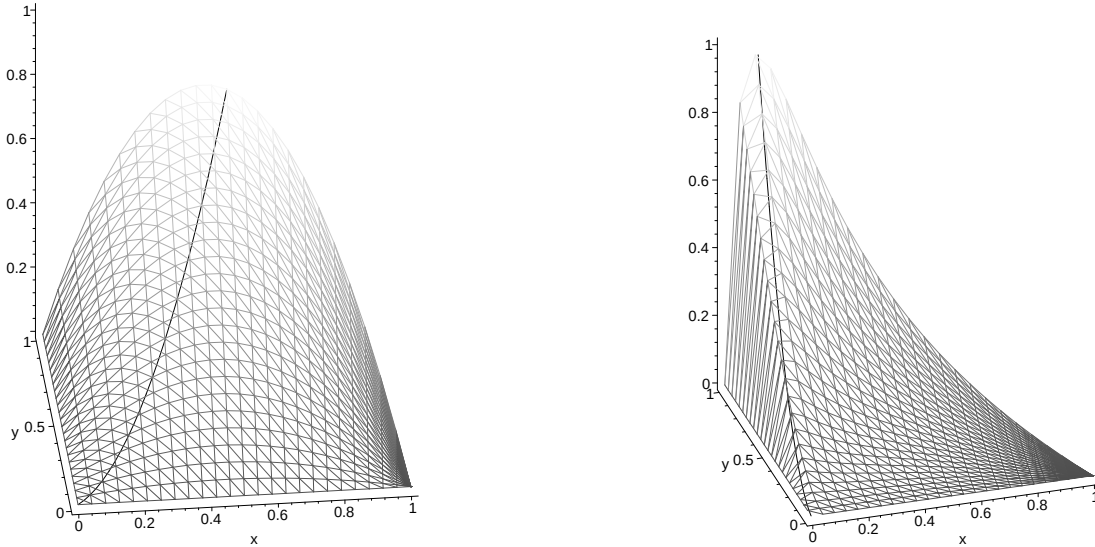
P2.2. - Espace des fractions massiques de fuel et d'oxydant. Fig. A : définition des isolignes 'rapport d'équivalence' (Φ), des isolignes 'fraction de mélange' (Z), et des isolignes de 'présence' p . Fig. B : définition de la coordonnée c le long de l'isoligne Φ .



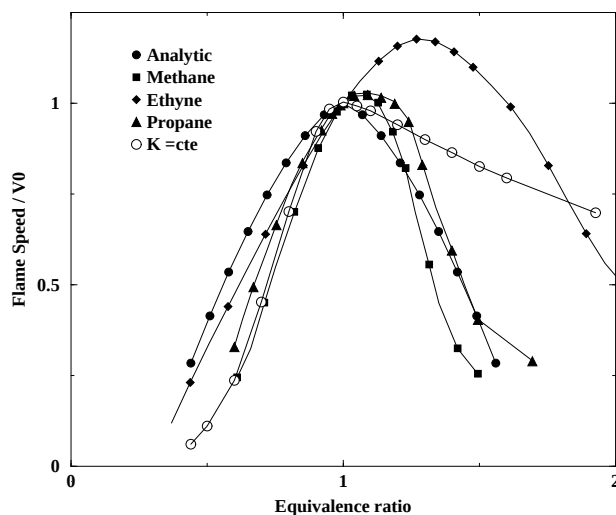
P2.3. - Evolution de trois échantillons de fluide issus de l'écoulement de combustible ($\mathcal{P}_F$), et de l'écoulement d'oxydant ($\mathcal{P}_O$ et $\mathcal{P}'_O$). En haut : régime partiellement prémélangé, $\mathcal{P}'_O$ est mélangé avec $\mathcal{P}_F$ avant de brûler dans un régime prémélangé riche. En bas à gauche : régime prémélangé riche. En bas à droite : régime non-prémélangé (ou de diffusion).



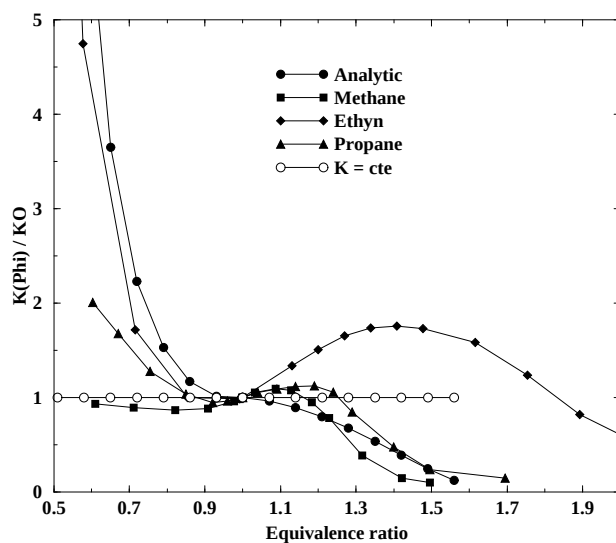
P2.4.a - Scénario d'une projection de paramètres d'une procédure de 'recalage'. ζ correspond au facteur de pente et les valeurs glissent le long de l'isoligne p depuis la fonction préexponentielle $\Phi_s = 1$ pour qu'elle soit recalée sur n'importe quelle fonction préexponentielle Φ_s .



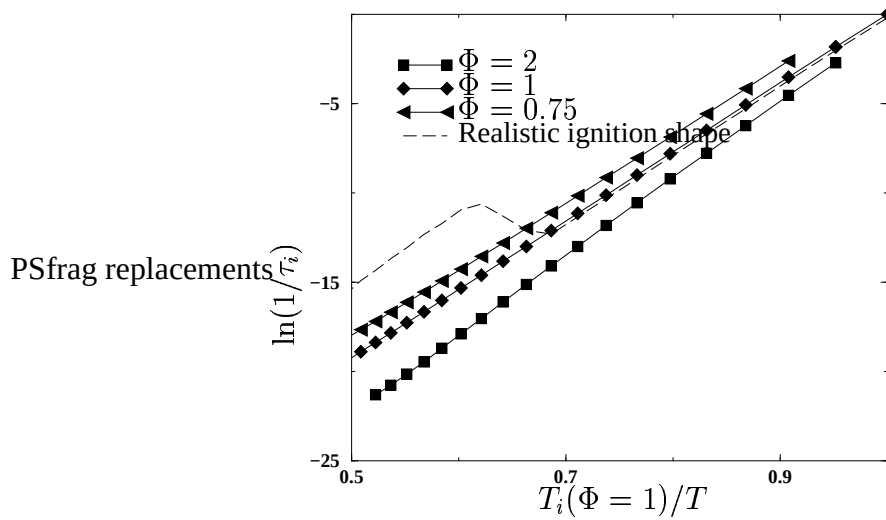
P2.4.b - Fonction préexponentielle originale définie par $\Phi_s = 1$ (à gauche) recalée sur l'espace des phases $\Phi_s = 10$ (à droite). La valeur maximale de la fonction (ligne noire) reste sur la ligne $\Phi = 1$. La fonction a été adimensionnée par sa valeur maximale.



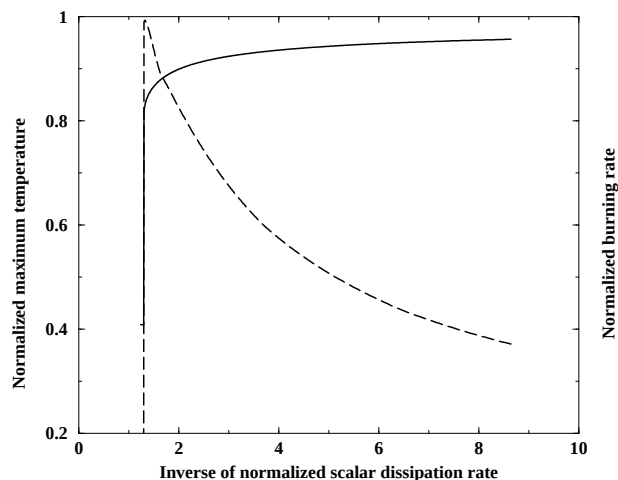
P2.5.a - Courbes en cloche normalisées déduites $V(\Phi)/V_0$ (lignes) et les courbes BSC résultantes d'après la méthode GKAS (symboles). Courbe analytique : une fonction symétrique est imposée $V(\Phi)/V_0 = (\Phi - 1)^{1.5}$. La courbe $K = cte$ donne les vitesses résultantes de la méthode GKAS avec un coefficient préexponentiel constant $K(\Phi)/K_0 = 1$.



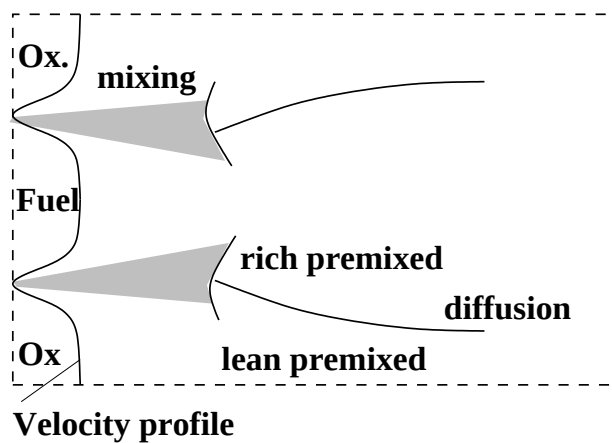
P2.5.b - Coefficients préexponentiels $K(\Phi)$ nécessaires à l'obtention de la courbe BSC désirée (fig. P2.5.a).



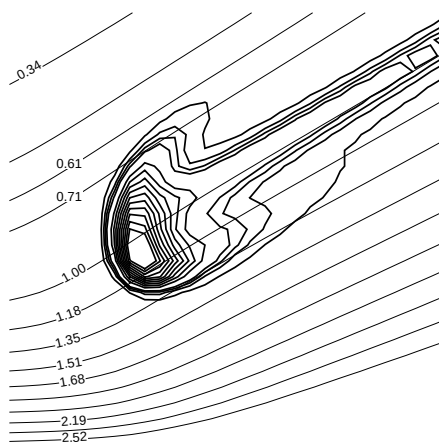
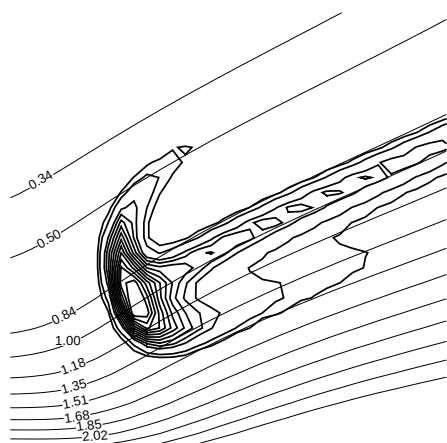
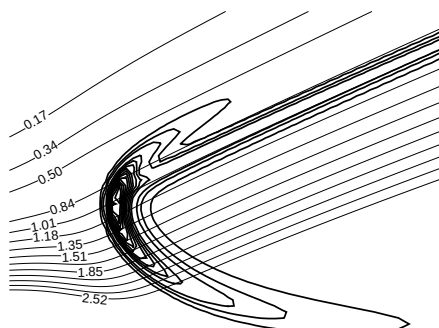
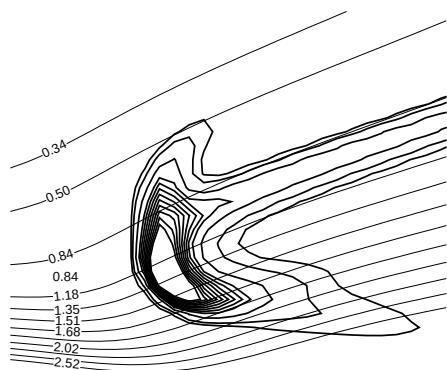
P2.6. - Délais d'allumage τ_i de l'éthyne pour divers rapports d'équivalence Φ (symboles). Pointillés : allure d'une courbe de délais d'allumage réaliste. Pour la méthode GKAS comme pour toute méthode de chimie globale, les pentes du délais d'allumage pour des régimes de température intermédiaires ne peuvent pas être capturées. $T_i(\Phi = 1)$ est la température minimale d'allumage pour un mélange stoechiométrique.



P2.7.a - Limite d'extinction du propane. La température (ligne) et le taux de réaction (pointillés) ont été normalisés par la valeur maximum de leur profil. Le taux de dissipation scalaire inverse est normalisé par sa limite d'extinction asymptotique.



P2.7.b - Schéma de la géométrie d'un double wake (double sillage). Le fuel et l'oxydant sont initialement séparés. La flamme est alors stabilisée par un front partiellement prémélangé.



Ethyn

K = cte

Analytic

Methane

Propane

P2.8. - *Formes (dégagement de chaleur) des flammes triples stabilisant la combustion dans un sillage comme une fonction de la courbe en cloche. Traits fins : rapport des iso-équivalence.*

Chapitre 3

Flammes diphasiques laminaires

3.1 Introduction du problème

Lorsque l'on étudie la combustion au sein d'un milieu turbulent purement gazeux, l'ensemble des propriétés et des comportements des flammes est souvent comparé avec la propagation d'une flamme laminaire plane. Cette dernière permet de caractériser simplement les propriétés de combustion intrinsèques au combustible qui est utilisé : température adiabatique de flamme, stœchiométrie, vitesse de propagation, épaisseur de flamme, etc. Il est particulièrement utile, pour toute analyse de milieux réactifs complexes de générer les flammes laminaires correspondantes pour différents niveaux de richesse voire de dilution.

Dans le cas de la combustion diphasique, nous conserverons la flamme laminaire gazeuse comme référence vis à vis des propriétés de combustion. Cependant, il apparaît naturel d'effectuer l'analyse de flammes laminaires diphasiques afin de comprendre une partie des nouveaux phénomènes apparaissant du fait de la présence d'un combustible liquide. En effet, le seul couplage combustion/spray homogène amène de nombreuses et intéressantes questions qui seront présentées dans ce chapitre.

Dans un premier temps, il est nécessaire de revenir sur la notion de richesse d'un mélange. En effet, si pour un combustible donné, le rapport d'équivalence à la stœchiométrie reste le même que ce combustible soit considéré sous forme gazeuse ou sous forme liquide, ce n'est plus le cas pour la notion de richesse. En effet, plusieurs richesses peuvent être définies dans le cas de la combustion diphasique si l'on considère le combustible sous forme liquide ou gazeuse ou encore sous forme locale ou globale. Dans un premier temps, l'ensemble de ces définitions

va être présenté.

Ensuite, nous allons nous concentrer sur l'un des facteurs primordiaux lors de la combustion d'un spray : la dynamique d'évaporation des gouttes. Cette dynamique, qui dépend des propriétés locales de la phase porteuse, peut modifier du tout au tout la structure et le régime de combustion, amenant éventuellement jusqu'à l'extinction d'une flamme dont les conditions de propagation paraissaient pourtant idéales.

Et enfin, pour clore ce chapitre, la propagation d'une flamme au sein d'un nuage de gouttelettes est abordée. Dans ce cas, la structure des flammes en fonction de la topologie du combustible liquide est étudiée comme introduction à la présentation de diagrammes de combustion diphasique.

3.2 Définitions

Au cours de l'analyse de la propagation d'une flamme au sein d'un brouillard de combustible, de nombreux paramètres globaux et locaux interviennent. Tout d'abord, la première notion à aborder est celle de la richesse d'un mélange. Ensuite, la définition de la fraction de mélange dans un écoulement gazeux est rappelée puis étendue au cas des écoulements diphasiques.

3.2.1 Richesse du mélange

La richesse traduit le ratio entre la quantité de combustible présent ou injecté dans la boîte avec la quantité correspondante de comburant, le tout, par rapport aux coefficients stœchiométriques de la réaction. Prenons le cas général d'un spray injecté au sein d'une chambre de combustion. La phase porteuse du spray est composée de comburant mais ce dernier peut aussi être injecté seul au sein de la chambre par d'autres orifices. Un schéma symbolisant cette chambre peut être vu figure 3.1.

Dans un premier temps, il est possible de définir la richesse globale liquide de l'injecteur : Φ_{LO}^I . De nombreux systèmes considèrent l'injection d'une fraction de combustible gazeux avec des gouttes mais ce n'est pas le cas dans les configurations présentées dans ce mémoire. C'est

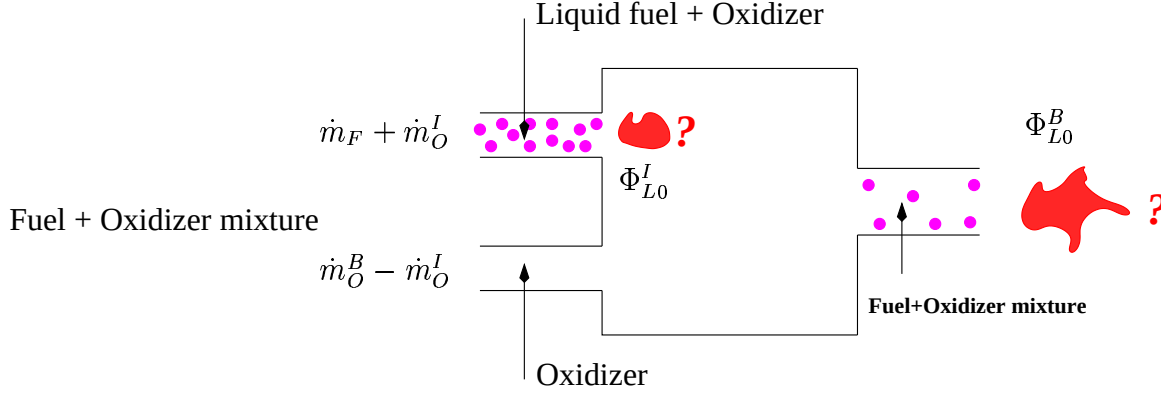


FIG. 3.1 – Schéma de l'injection de combustible dans un brûleur. Définition de la richesse liquide d'injection et de la richesse liquide globale.

pourquoi, la définition suivante est employée :

$$\Phi_{L0}^I = \Phi_s * \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O^I} \quad , \quad (3.1)$$

où Φ_s qui a déjà été défini dans le chapitre 2, est le rapport stœchiométrique de la réaction. $\dot{m}_F$ et $\dot{m}_O^I$ sont respectivement les flux massiques de combustible liquide et de comburant au sein de l'injecteur. Si d'autres sources d'injection de comburant existent, il est nécessaire de définir une richesse globale de la chambre de combustion (ou brûleur) :

$$\Phi_{L0}^B = \Phi_s * \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O^B} \quad ,$$

où $\dot{m}_O^B$ est le flux massique total d'oxydant injecté dans la chambre. Dans le cadre d'un système où la combustion a lieu au niveau de l'injecteur, la première définition sera utilisée car le mélange au sein duquel les flammes se stabiliseront sera directement issu de l'injecteur de richesse globale Φ_{L0}^I . Si le combustible est dispersé puis évaporé avant que la combustion n'ait lieu (système de prévaporisation LPP - Lean Premixed Prevaporized) alors c'est la richesse globale Φ_{L0}^B du brûleur qui nous permettra de caractériser la combustion dans la chambre.

Ces définitions permettent de donner les caractéristiques globales d'une chambre de combustion. Cependant, des définitions de richesses locales doivent intervenir pour des études plus précises concernant les régimes de combustion et les structures de flamme. En effet, comme cela a déjà été abordé en détail dans le chapitre concernant la chimie, la vitesse de propagation

des flammes au sein du mélange gazeux peut être caractérisée directement par la richesse gazeuse locale Φ_G . Si l'ensemble du spray n'est pas encore évaporé quand la combustion a lieu alors, un réservoir de combustible (phase liquide) existe au sein de la flamme. Un terme de richesse locale liquide doit alors être défini : Φ_L . Cette dernière, surtout dans le cas de la DNS de sprays dispersés sera très souvent nulle au sein des flammes. Cependant, lorsque ce n'est pas le cas, il faut pouvoir quantifier les réserves en combustible liquide au sein de la flamme ou dans les gaz brûlés. Néanmoins, du point de vue de la cinétique une flamme ne "voit" que la richesse gazeuse locale Φ_G . Des calculs préliminaires qui seront détaillés ultérieurement nous ont montré un comportement étrange des flammes se propageant au sein d'un spray. En effet, ces flammes étaient beaucoup plus rapides dans le cas d'une injection liquide pauvre, une injection à la stœchiométrie menant à une vitesse de propagation faible, avec des résidus de vapeur de combustible. C'est pourquoi, afin de bien comprendre le mécanisme d'évaporation du spray menant à une modification apparente des propriétés de propagation de la flamme, une petite étude analytique de la richesse gazeuse issue d'un spray est tout d'abord effectuée.

3.2.2 Richesse gazeuse issue de l'évaporation

Dans le chapitre 1 de ce manuscrit consacré au système numérique DNS/Lagrangien, l'évaporation d'une goutte au sein d'une atmosphère au repos avec des conditions locales constantes de température, de pression et de concentration de vapeur a été détaillée. Ce système nous a permis de définir l'ensemble des équations de transport, de chauffage et d'évaporation des gouttes de combustible.

Cependant, dans le cas pratique de l'injection de ces gouttes dans une chambre de combustion, où leurs trajectoires instationnaires les mèneront à traverser de nombreuses zones dont les propriétés de température et de concentration en combustible sont très différentes (gaz frais, front de flamme, gaz brûlé, etc), leur influence sur la phase gazeuse pourra être fort variable.

Si, comme nous l'avons fait dans l'ensemble de ce manuscrit, nous ne considérons que la combustion dans des systèmes ouverts à la pression atmosphérique, alors, c'est la température du gaz autour de la goutte qui va jouer un rôle prépondérant dans l'évaporation de cette dernière. Cependant, l'influence du niveau de température n'agit pas que sur la goutte mais aussi sur le gaz (oxydant + vapeur de combustible) environnant. Et, si le niveau de cette température locale

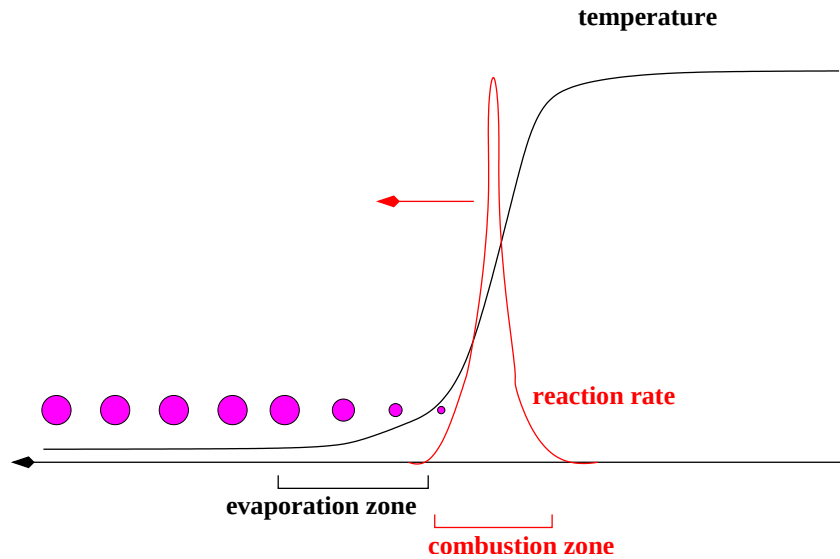


FIG. 3.2 – Schéma d'une flamme se propageant dans un spray de combustible

varie en fonction des conditions de l'écoulement alors l'évaporation de la goutte pourra avoir des effets très variables.

Prenons le cas simple de la propagation d'une flamme laminaire au sein d'un spray de combustible monodisperse (diamètre initial des gouttes constant), qui est schématisé fig 3.2. Les gouttes de combustible sont évaporées par l'élévation de température qui précède le front de flamme.

Nous allons considérer la zone d'évaporation préliminaire au front de flamme qui consomme l'oxydant et la vapeur de combustible. Beaucoup de phénomènes fondamentaux pour la combustion entrent en jeu au sein de cette zone. En effet, si l'on se place dans le référentiel d'une goutte au sein du spray qui va subir le passage de la flamme, les étapes seront les suivantes : tout d'abord, dans le cas considéré, la taille de la goutte est constante et elle est immobile. Ensuite une légère augmentation de la température a lieu. Si cette augmentation est faible comparée au dégagement de chaleur total de la flamme, ce n'est pas le cas lorsqu'on la compare à la température de saturation du combustible et la goutte va commencer à s'évaporer. Cependant, un deuxième élément est à prendre en compte : la dilatation des gaz entourant le liquide. Lorsque la température s'élève, la masse volumique locale diminue et l'oxydant et la fraction de liquide déjà évaporée s'évacuent du voisinage de la goutte du fait de la dilatation des gaz. Cette "fuite"

des gaz est primordiale lorsque le front réactif arrivera dans la zone car les richesses locales peuvent être totalement modifiées. C'est pourquoi, dans un premier temps, nous allons nous consacrer à l'analyse de l'évaporation d'une goutte située dans un milieu subissant le passage d'un front thermique. En effet, dans ce cas, nous allons pouvoir observer la compétition entre deux phénomènes : la vitesse de dilatation des gaz autour de la goutte par rapport à la vitesse d'évaporation de cette dernière. Si l'évaporation est plus lente que la dilatation des gaz alors une grande masse d'oxydant aura quitté le voisinage et la richesse gazeuse finale sera bien plus importante que si la goutte s'évapore très rapidement avant la dilatation totale des gaz.

3.3 Modèle analytique du problème

Nous allons considérer une goutte $\mathcal{D}$ isolée au sein d'un volume cubique $\mathcal{V}$ caractérisé par la densité d du spray considéré. d gouttes par unité de volume mènent à un volume d'isolement moyen $\mathcal{V} = 1/d$ par goutte (ou volume d'air pour une goutte de combustible). Pour modéliser la propagation de la flamme au sein du spray, nous avons choisi d'utiliser une augmentation globale de la température du gaz autour de la goutte. La pression au sein du volume considéré demeurant constante, l'élévation de température provoque une dilatation des gaz qui sont évacués par les parois du volume de contrôle.

3.3.1 Surface initiale et température des gaz

Soit une goutte de combustible plongée au sein du volume fixé $\mathcal{V}$. Le diamètre de cette goutte est déterminé en fonction de la richesse liquide initiale Φ_{LO} que l'on souhaite étudier. Notre objectif est de pouvoir déterminer la richesse gazeuse finale en fonction de Φ_{LO} et de la vitesse d'élévation de température dans le volume. La surface initiale de la goutte est donc définie à partir de la richesse :

$$\Phi_{LO} = \Phi_s * \frac{m_F}{m_O} , \quad (3.2)$$

où Φ_s est le coefficient stœchiométrique, $m_F = \pi \rho_d a^3 / 6$ la masse de combustible liquide et $m_O = \rho \mathcal{V}$ la masse d'oxydant. De ce fait, la surface initiale s_0 de la gouttelette peut être

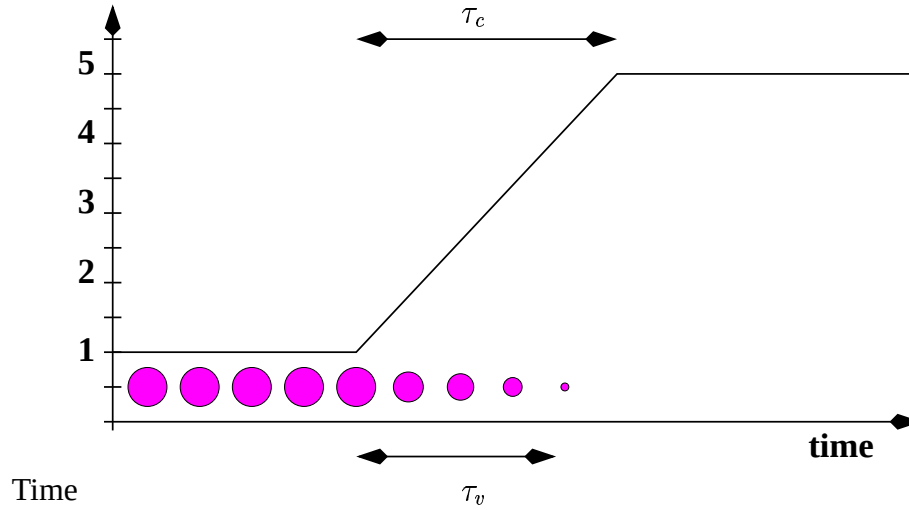


FIG. 3.3 – Schéma du problème simplifié de l'évaporation

déterminée grâce à la relation :

$$s_0 = \left(6\sqrt{\pi} \mathcal{V} \frac{\rho \Phi_{L0}}{\rho_d \Phi_s} \right)^{2/3}, \quad (3.3)$$

où ρ_d est la masse volumique du combustible liquide et ρ celle du gaz.

Nous allons considérer une augmentation linéaire en temps du front de température depuis la température des gaz frais T_0 jusqu'à la température adiabatique de combustion T_b qui sera utilisée ultérieurement dans les écoulements réactifs. T_0 sert de température de référence pour la normalisation du problème. Dans ce qui suit, nous avons donc $T_0 = 1$ et $T_b = 5$ ce qui nous donne un saut de température de 4. Le paramètre clef de cette élévation de température est τ_c , le temps caractéristique de chauffage qui est à opposer à τ_v le temps caractéristique d'évaporation de la goutte (Fig 3.3).

3.3.2 Evolution de la fraction massique de vapeur

La variation de la température suivant le schéma présenté figure 3.3 agit sur deux éléments: d'une part sur le taux d'évaporation de la goutte au sein du volume $\mathcal{V}$ et d'autre part sur la masse volumique du gaz environnant. Ecrivons à présent les équations d'évolution des différents paramètres gazeux sachant que, étant à pression constante, notre loi d'état normalisée nous

indique que $\rho(t) = 1/T(t)$. L'évolution des fractions massiques dans la cellule s'écrit :

$$\frac{d\rho}{dt} = f(t) \quad , \quad (3.4)$$

$$\frac{d\rho Y_F}{dt} = \dot{m} - \dot{\epsilon}_F \quad , \quad (3.5)$$

$$\frac{d\rho Y_O}{dt} = -\dot{\epsilon}_O \quad , \quad (3.6)$$

où $f(t)$ est le taux de variation imposé, relié à la température, de la masse volumique du gaz dans la cellule. $\dot{\epsilon}_F$ et $\dot{\epsilon}_O$ sont respectivement les masses de combustible et d'oxydant gazeux éjectés de la cellule du fait de la dilatation des gaz. Sachant que l'on doit respecter la relation $Y_F + Y_O = 1$ alors en additionnant les équations 3.5 et 3.6 et en effectuant une égalité avec 3.4 nous obtenons la relation :

$$\dot{m} - \dot{\epsilon}_F - \dot{\epsilon}_O = f(t) \quad . \quad (3.7)$$

De plus nous allons considérer que la masse éjectée d'un composant est proportionnelle à la présence de ce composant dans la cellule (rappelons que le combustible et l'oxydant sont considérés comme ayant les même masses molaires) soit :

$$\frac{\dot{\epsilon}_F}{\dot{\epsilon}_F + \dot{\epsilon}_O} = \frac{Y_F}{Y_F + Y_O} \quad , \quad (3.8)$$

ce qui nous amène à la relation

$$\dot{\epsilon}_O = \left(\frac{1 - Y_F}{Y_F} \right) \dot{\epsilon}_F \quad , \quad (3.9)$$

qui est introduite dans l'équation 3.7. Nous obtenons alors :

$$\dot{\epsilon}_F = (\dot{m} - f(t)) Y_F \quad . \quad (3.10)$$

Cette expression est alors utilisée dans l'équation 3.5 qui s'écrit :

$$\frac{d\rho Y_F}{dt} = \dot{m} - \dot{m} Y_F + f(t) Y_F \quad . \quad (3.11)$$

En developpant le terme de gauche afin d'écrire la forme non-conservative de l'équation, nous obtenons :

$$Y_F f(t) + \rho(t) \frac{dY_F}{dt} = \dot{m} - \dot{m} Y_F + f(t) Y_F \quad , \quad (3.12)$$

soit

$$\frac{dY_F}{dt} = \frac{1}{\rho(t)} \dot{m} (1 - Y_F) \quad , \quad (3.13)$$

ou encore

$$\frac{dY_F}{dt} = T(t) \dot{m} (1 - Y_F) \quad . \quad (3.14)$$

A partir de l'évolution temporelle de Y_F , la richesse du mélange peut être définie grâce à la relation :

$$\Phi(t) = \Phi_s \frac{Y_F(t)}{1 - Y_F(t)} \quad . \quad (3.15)$$

Il s'agit à présent de déterminer la valeur du taux d'évaporation $\dot{m}$ de combustible gazeux en fonction de la température locale.

3.3.3 Modèle pour l'évaporation de la goutte

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 1 dédié aux systèmes numériques, plusieurs modèles d'évaporation sont envisageables : soit la loi du d^2 ($B = cte$), la loi d'indexation sur la température ($B = B(T)$) ou la loi de saturation ($B = B(T, P, Y_F)$). Dans le cadre d'un problème modèle simplifié basé sur l'élévation de température des gaz autour de la goutte, nous avons sélectionné la seconde solution : le modèle IAT tel que $B = B(T)$. En effet, la loi du d^2 ne nous permettrait pas de contrôler le temps d'évaporation de la goutte, la loi de saturation est inutile sachant que la pression environnante reste constante et que c'est principalement la température qui va contrôler le niveau de saturation de la goutte sachant que la fraction massique totale de combustible gazeux reste toujours très faible. L'indexation sur la température étant telle que $B(T) = \mathcal{A}(T - 1)$, le paramètre $\mathcal{A}$ nous permet un contrôle parfait du temps caractéristique d'évaporation qui est tel que

$$\tau_v = \frac{S_c}{4Sh_c} \frac{\rho_d}{\mu^*} \frac{a^2}{\ln(1 + B)} \quad , \quad (3.16)$$

tout en demeurant dépendant du paramètre température. Donc, dans ce cas modèle, le paramètre $\mathcal{A}$ est déterminé en fonction du temps d'évaporation caractéristique désiré :

$$\mathcal{A} = \frac{1 - \alpha}{\alpha} \left[\exp \left(\frac{S_c R_e \rho_d a_0^2}{4Sh_c \tau_v} - 1 \right) \right] \quad . \quad (3.17)$$

Variable	Valeur	Variable	Valeur
R_e	3000	S_c	0.7
μ	1	ρ_d	684
S_{hc}	2	α	0.8
ρD	4.761E-3	P_r	0.7

TAB. 3.1 – Paramètres physiques constants des différentes simulations. Les valeurs sont adimensionnées.

où α est le coefficient du taux de dégagement de chaleur.

Nous avons donc l'expression suivante pour le taux d'évaporation :

$$\dot{m} = 2\sqrt{\pi s}\rho D \ln(1 + \mathcal{A}(T - 1)) \quad , \quad (3.18)$$

avec ρD un coefficient constant tel que $\rho D = \mu/(ReSc)$ avec l'adimensionnement acoustique utilisé jusqu'à présent. L'évolution de la masse de la goutte s'écrit :

$$\frac{dm_F}{dt} = \frac{\rho_d}{4} \frac{\sqrt{s}}{\sqrt{\pi}} \frac{ds}{dt} = -2\sqrt{\pi s}\rho D \ln(1 + \mathcal{A}(T - 1)) \quad , \quad (3.19)$$

soit, pour l'évolution de la surface s ,

$$\frac{ds}{dt} = -\frac{8\pi}{\rho_d} \frac{\mu}{ReSc} \ln(1 + \mathcal{A}(T(t) - 1)) \quad . \quad (3.20)$$

3.3.4 Paramètres et résultats

Si nous considérons comme origine des temps l'instant où le niveau de température commence à s'élever, l'évolution de cette dernière peut se traduire au travers de la relation suivante :

$$\begin{cases} T(t) = T_0 + \frac{T_b - T_0}{\tau_c} t & \text{si } t < \tau_c \\ T(t) = T_b & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.21)$$

L'ensemble des paramètres physiques constants présents dans les équations sont résumés dans le tableau 3.1.

Les paramètres variables du problème sont donc les temps caractéristiques de chauffage τ_c et d'évaporation τ_v dont le ratio peut se traduire par l'intermédiaire d'un nombre adimensionnel :

$$D_v = \tau_v/\tau_c \quad (3.22)$$

D_v traduit donc la vitesse caractéristique d'évaporation des gouttes par rapport à la vitesse d'échauffement du domaine dans lequel se trouve la goutte. Si ce nombre est petit ($D_v \ll 1$), alors la goutte s'évapore beaucoup plus vite que son environnement ne s'échauffe. En effet, la température dans le domaine va augmenter principalement une fois que la goutte est évaporée. Le phénomène de dilatation des gaz influence donc peu la richesse gazeuse finale. En revanche, si D_v est grand, alors la goutte s'évapore lentement par rapport aux taux d'échauffement du gaz. L'augmentation de la température entraîne une dilatation des gaz, ce qui conduit à une diminution de la densité. La goutte s'évapore alors dans un domaine plus pauvre en oxydant. La richesse gazeuse finale est donc beaucoup plus importante que la richesse liquide initiale.

La résolution analytique de l'évaporation de deux gouttes de même dimension est réalisée pour deux valeurs de D_v bien distinctes ($D_v = 0.3125$ et $D_v = 1.25$), afin de vérifier les deux comportements et de quantifier ce phénomène. La richesse liquide initiale est égale à 1. La planche P3.1.a représente l'évolution de la surface de la goutte en fonction du temps pour les deux valeurs de D_v . La goutte ayant un D_v grand (carrés rouges) suit une loi d'évaporation quasi-linéaire, excepté au début et à la fin de l'évaporation, ce qui n'est pas le cas pour la goutte dont le rapport D_v est petit (cercles noirs). De plus, on peut voir sur la planche P3.1.b que la goutte avec un D_v petit s'évapore complètement ($t = 0.16$) bien avant que la température n'atteigne sa valeur maximale T_b . Par contre, dans le cas où D_v est grand (en rouge), c'est-à-dire dans le cas où la vitesse d'évaporation est plus lente que celle de l'échauffement, la température du domaine atteint la valeur maximale T_b ($t = 0.08$) avant que la goutte ne soit complètement évaporée. Le phénomène de dilatation des gaz va donc avoir un impact différent dans ces deux cas de figure.

L'évolution de la fraction massique gazeuse de fuel Y_{Fg} en fonction du temps est représentée planche P3.1.c, On peut noter que la valeur de Y_{Fg} est beaucoup plus importante dans le cas où D_v est grand (en rouge), c'est-à-dire quand la température atteint rapidement son maximum T_b . En effet, prenons par exemple les valeurs de la fraction massique gazeuse Y_{Fg} à $t = 0.1$ soient : $Y_{Fg}(D_v = 0.3125) = 0.061$ et $Y_{Fg}(D_v = 1.25) = 0.164$. Nous avons donc une quantité de combustible environ 2.7 fois plus importante dans le cas $D_v = 1.25$ (en rouge) par rapport au cas $D_v = 0.3125$ (en noir). Ceci s'explique par le fait que l'élévation de température qui est plus rapide dans le cas où D_v est grand (en rouge), entraîne une dilatation plus importante

des gaz en dehors de domaine. En effet, si l'on regarde les équations 3.14 et 3.18, on peut remarquer que la fraction massique gazeuse de combustible Y_{Fg} est liée à la température. Par conséquent, une température élevée va conduire naturellement à une fraction massique gazeuse de combustible importante. Ainsi, la goutte s'évapore dans un milieu devenu pauvre en oxydant (cf planche P3.1.-c), ce qui conduit à une fraction massique gazeuse de combustible élevée. A l'inverse, dans le cas où D_v est petit (en noir), la goutte s'évapore plus rapidement que les gaz ne se dilatent, d'où une fraction massique finale de combustible Y_{Fg} plus faible que dans le cas D_v grand.

Le paramètre D_v a donc une influence très importante sur la valeur de la richesse gazeuse finale Φ_G . La planche P3.2.a représente l'évolution du rapport richesse gazeuse/richeesse liquide initiale en fonction de D_v . Nous remarquons qu'il peut y avoir jusqu'à un rapport 5 entre la richesse liquide initiale Φ_L et la richesse gazeuse finale Φ_G . Ce rapport est le même que celui entre la température des gaz brûlés T_b et la température des gaz frais T_u dans le cas de la flamme laminaire prémélangée de référence. On a donc la relation suivante :

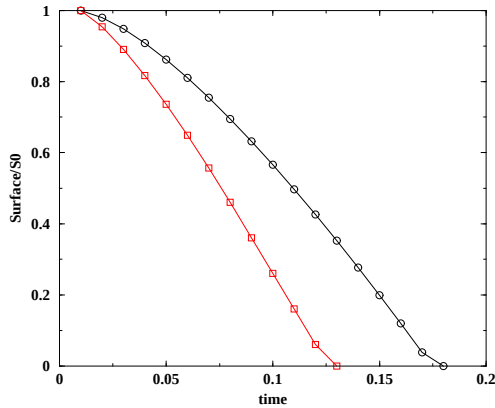
$$\frac{\Phi_G}{\Phi_L} < 5 = \frac{T_b}{T_u} = \frac{\rho_u}{\rho_b} \quad (3.23)$$

Le rapport entre richesse gazeuse et richesse liquide est donc limité par le rapport entre les densités des gaz frais et des gaz brûlés. D'autre part, la compétition entre vitesse d'évaporation des gouttes et vitesse d'élévation de la température est le facteur essentiel pour le calcul de Φ_G . Ce paramètre D_v va donc être déterminant lorsque la combustion a lieu puisque même avec une richesse liquide pauvre, on peut avoir une richesse gazeuse Φ_G élevée. Par conséquent, une flamme peut avoir des difficultés pour se propager et brûler. Si la quantité de combustible liquide prévue initialement est trop importante, elle peut aussi conduire à l'extinction de la flamme. Nous pouvons également remarquer sur la planche P3.2.b, qu'à partir de richesses liquides initiales différentes, nous pouvons obtenir la même richesse gazeuse finale, ce résultat étant conditionné par la valeur du rapport D_v . Ceci confirme bien que le nombre D_v peut changer complètement le type de combustion. De plus, si nous négligeons l'absorption de l'énergie par les gouttes, il est possible d'estimer un premier décalage dans la courbe en cloche de la vitesse de propagation de flamme par rapport à la richesse liquide Φ_L . Dans le cas d'une flamme purement gazeuse, la vitesse de flamme est maximale pour une richesse Φ_G proche de l'unité,

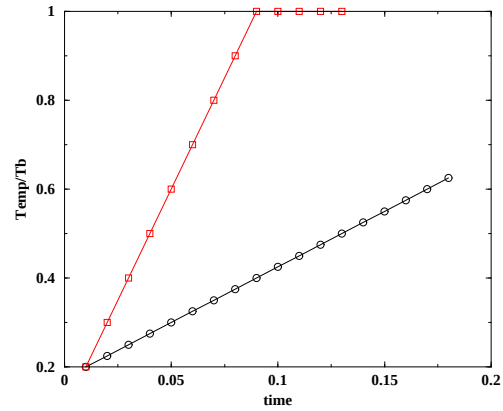
ce qui n'est pas le cas pour une flamme diphasique pour qui la richesse gazeuse est largement sous-estimée par rapport à la richesse liquide initiale. La conséquence en est que le maximum de notre courbe en cloche dans le cas de la propagation d'une flamme diphasique se trouvera donc décalée vers une richesse liquide plus faible que celle d'une flamme purement gazeuse. La planche P3.3. est un zoom de la planche P3.2.b, où la courbe en cloche de la vitesse de flamme a été rajoutée. Nous pouvons voir qu'il sera possible d'avoir une vitesse de flamme maximale même en ayant pris une richesse liquide faible, tout dépendra du nombre D_v . Le comportement d'une flamme peut donc être complètement différent. En effet, pour une richesse liquide définie, la flamme peut se propager lentement ou très rapidement et nous pouvons observer jusqu'à l'extinction de la flamme si le nombre adimensionnel D_v est grand.

3.3.5 Conclusion

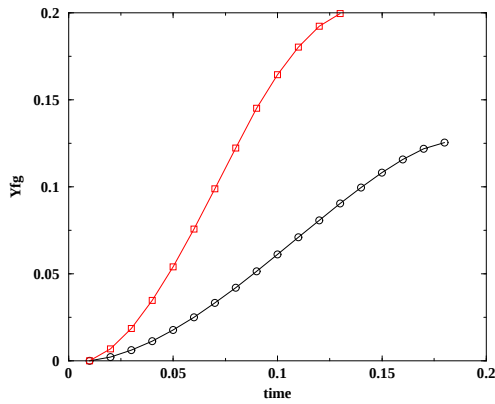
La résolution analytique de l'évaporation d'une goutte nous a permis de montrer que le nombre D_v , représentant le rapport entre vitesse d'évaporation et vitesse d'échauffement de la goutte, joue un rôle important dans la comparaison richesse gazeuse Φ_G et richesse liquide Φ_L puisqu'il peut y avoir jusqu'à un rapport cinq entre Φ_G et Φ_L , ce qui peut modifier complètement le mode de combustion. Nous pouvons donc discerner deux cas dans la combustion de spray : le cas où les gouttes sont réparties de manière homogène et les poches de gouttes (ou cluster de gouttes). Dans le premier cas, une richesse liquide trop importante peut conduire à l'extinction de la flamme car la richesse locale gazeuse sera trop forte alors que dans le second cas, la richesse locale gazeuse peut être plus faible du fait de la présence de poches d'oxydant, ce qui peut permettre à la flamme de se propager sous la forme de fronts partiellement prémélangés.



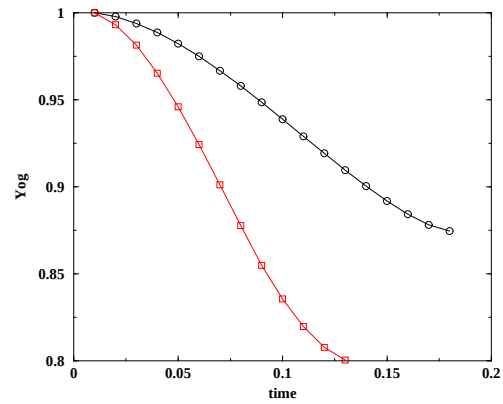
(a)



(b)



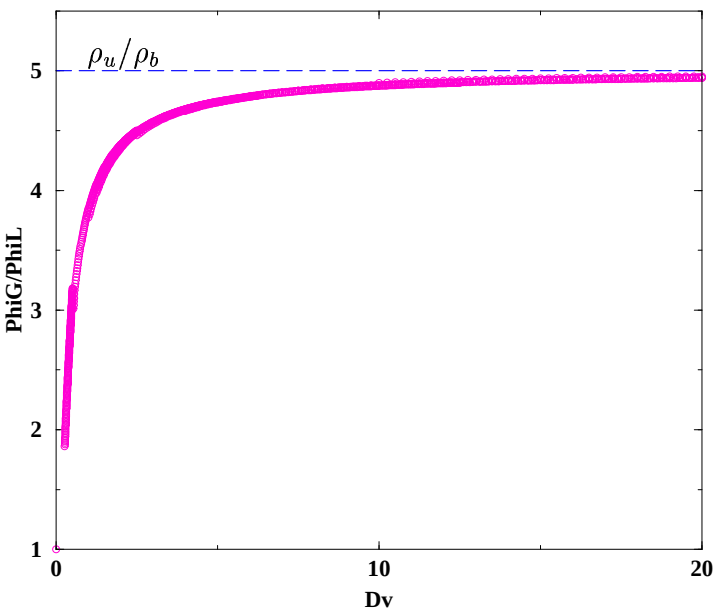
(c)



(d)

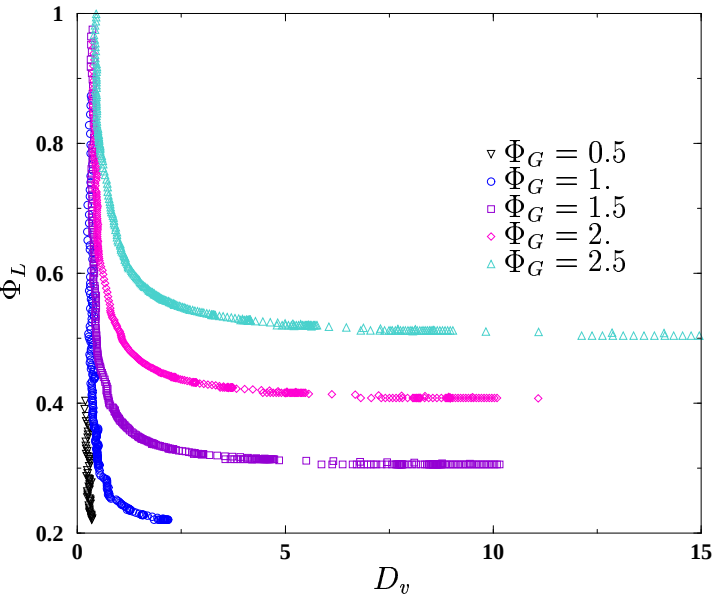
P3.1. - Solution analytique de l'évaporation d'une goutte placée dans un volume V . Evolution temporelle pour deux valeurs de D_v (carrés $D_v = 1.25$, cercles : $D_v = 0.3125$) (a) : de la surface de la goutte, (b) : de la température extérieure, (c) : de la fraction massique gazeuse de fuel, (d) : de la fraction massique d'oxydant, (e) : du taux d'évaporation. (f) : évolution du rapport richesse gazeuse/richeesse liquide initiale en fonction de D_v .

PSfrag replacements

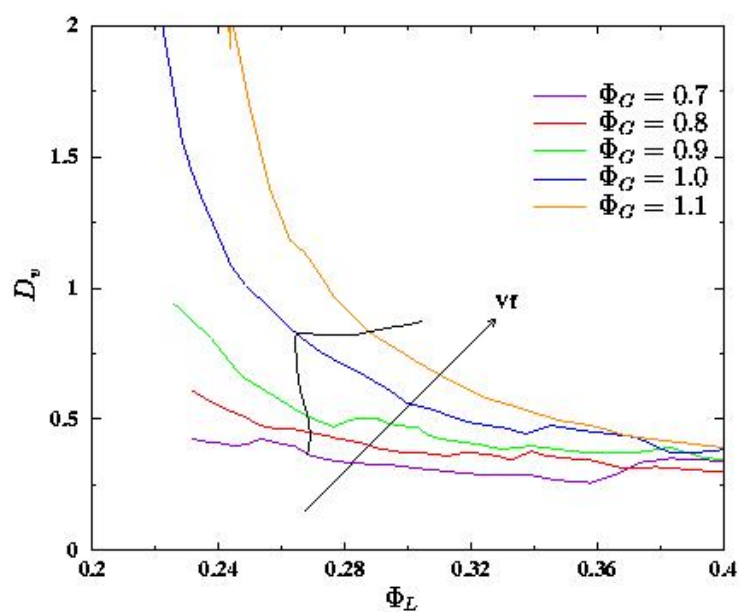


P3.2.a - Evolution du rapport richesse gazeuse/richeesse liquide initiale en fonction de D_v .

PSfrag replacements



P3.2.b - Evolution de la richesse gazeuse finale Φ_G en fonction de la richesse liquide initiale Φ_L et du rapport D_v .



P3.3. - Evolution de la richesse gazeuse finale Φ_G en fonction de la richesse liquide initiale Φ_L et du rapport D_v . Zoom sur la région $\Phi_G = 1$.

3.4 Flammes diphasiques monodimensionnelles

Pour toute étude basée sur les phénomènes de combustion, il est important de connaître les propriétés fondamentales des flammes issues du mécanisme chimique sélectionné. C'est pourquoi, la vitesse de propagation en fonction de la richesse du milieu, l'épaisseur de flamme, son dégagement de chaleur, etc, sont déterminés grâce à des études monodimensionnelles dédiées à la propagation de flammes laminaires. Il est possible d'effectuer ces travaux préliminaires soit sous forme analytique soit sous forme numérique. L'analyse expérimentale est possible elle aussi mais elle fournit moins d'information. Elle est cependant nécessaire à la validation des modèles.

Le calcul analytique de la propagation de flammes laminaires au sein d'écoulements diphasiques a fait l'objet de nombreuses études jusqu'à présent. Un des premiers à avoir proposé un modèle pour les sprays polydispersés est Williams [79]. Il s'est restreint aux cas monodisperses pour son analyse de la combustion de sprays, afin d'obtenir des solutions analytiques pour deux cas bien distincts : soit toutes les gouttes s'évaporent avant d'atteindre le front de flamme, soit chaque goutte brûle avec une enveloppe de flamme de diffusion autour d'elle. D'autres, comme Patil *et al* [50] et Richards et Sojka [61] ont travaillé sur le dernier cas en utilisant l'approche de Williams sur les sprays polydispersés. Lin *et al* [42, 43] ont étudié la réaction chimique homogène entre la vapeur de combustible et l'oxydant et la combustion individuelle en enveloppe de gouttes. Leurs analyses se sont également limitées aux cas de sprays monodisperses dans lesquels le spray fournit seulement une petite partie du combustible qui est brûlé.

Polymeropoulos [55] a proposé, d'après des résultats théoriques et expérimentaux, une expression pour la vitesse de flamme dans un spray. Mais les résultats numériques de Polymeropoulos [54] utilisent la superposition de sprays monodisperses pour représenter un spray polydisperse, ce qui empêche toute interaction goutte-goutte. Mizutani [47] a étudié les sprays polydispersés en utilisant, pour leur description, la fonction de distribution de Nakiyama-Tanasawa mais l'évolution de sa distribution était calculée d'après des modèles d'évaporation d'une goutte unique. Les influences entre gouttes n'étaient donc pas prises en compte.

Plus récemment, Greenberg *et al* [67, 68, 69] ont analysé la propagation monodimensionnelle d'une flamme spray polydisperse laminaire prémélangée et ont examiné la façon dont la

polydispersité du spray ainsi que la coalescence des gouttes influencent la vitesse de combustion. Ils ont vu que pour des mélanges riches en combustible au niveau du front de flamme, l'oxygène est consommé dans la zone de réaction et les gouttes qui ne sont pas complètement évaporées refroidissent la région située derrière la flamme et continuent à s'évaporer. Pour des mélanges pauvres au niveau du front de flamme, les gouttes qui arrivent à traverser le front de flamme brûlent individuellement ou en clusters sous la forme d'enveloppes de flammes de diffusion dans une région riche en oxydant, le taux de réaction de ces flammes de diffusion étant calculé principalement par le taux d'évaporation des gouttes.

Greenberg *et al* ont également proposé un modèle simple pour la propagation d'un front de flamme dans un mélange riche en vapeur de gouttes de combustible [32]. Ils ont montré que dans certaines circonstances, une flamme spray peut être cellulaire (instable) alors que la flamme gazeuse équivalente peut être complètement stable. De même, lorsqu'une flamme gazeuse est elle-même cellulaire, la flamme spray équivalente a une structure cellulaire plus fine. Il a été montré aussi que l'effet principal du spray sur la stabilité de ces flammes est dû à la perte de chaleur qui est utilisée par les gouttes pour leur évaporation.

Nous nous sommes donc intéressés à la propagation de flammes laminaires diphasiques pour deux raisons principales. D'une part, les calculs analytiques sont basés sur un certain nombre d'approximations qui n'apparaissent pas dans nos calculs DNS. Par exemple, le fait que les gaz soient dilatables n'a jamais été abordé jusqu'à présent. Or, comme nous l'avons vu dans l'étude précédente, cet effet de dilatation de l'oxydant et de la vapeur de combustible autour des gouttes a des conséquences très importantes sur la richesse du mélange gazeux et donc sur les caractéristiques des flammes qui se propagent dans le milieu. D'autre part, effectuer une étude laminaire avec exactement les mêmes équations que celles qui seront utilisées dans l'ensemble de ce travail permet d'avoir les caractéristiques précises des flammes étudiées. Ces caractéristiques peuvent alors servir de référence. De plus, comme ce sera démontré par la suite, des phénomènes assez complexes apparaissent. Il est alors plus simple de les analyser d'un point de vue numérique.

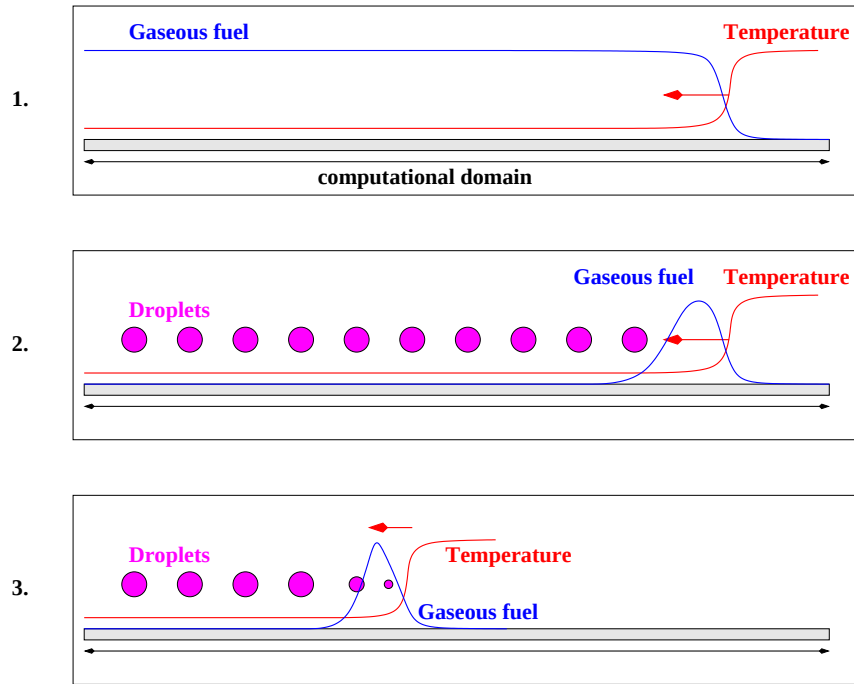


FIG. 3.4 – Schéma de l'allumage d'une flamme 1D diphasique.

3.4.1 Configuration et allumage

Lorsque des flammes prémélangées laminaires purement gazeuses sont stabilisées grâce à la simulation numérique directe, un changement de référentiel Galiléen suffit pour centrer la flamme au centre du domaine de calcul jusqu'à atteindre une vitesse d'injection des gaz frais stationnaire et donc une solution convergée.

Cette méthode ne peut être appliquée dans le cas où des gouttes de combustible liquide nourrissent la flamme. En effet, il est très difficile d'effectuer le changement de référentiel sachant que l'inertie liée au temps d'évaporation des gouttes ne permet pas d'effectuer un changement de référentiel immédiat pour toute modification de la vitesse de propagation de la flamme.

C'est pourquoi, la configuration utilisée est plus pragmatique. La rapidité de calcul des configurations monodimensionnelles nous permet d'utiliser de très longs domaines. Une flamme prémélangée stœchiométrique gazeuse est donc tout d'abord stabilisée à l'une des extrémités du domaine (fig. 3.4-étape 1). Ensuite, le champ convergé est modifié afin de supprimer le combustible gazeux en amont de la flamme puis un changement de référentiel Galiléen est effectué afin

que la vitesse des gaz amont soit nulle (fig. 3.4-étape 2). Des gouttes de combustible liquide sont alors disposées en amont de la flamme qui commence à se propager dans le domaine. Après un certain temps nécessaire à la mise en régime de la combustion diphasique, un état stable est atteint (fig. 3.4-étape 3). Comme cela sera montré dans la partie dédiée aux résultats, la vitesse de propagation de la flamme n'atteint pas un état stationnaire stable. En effet, des oscillations régulières de la vitesse apparaissent. La validité de la méthode a été vérifiée dans des cas purements gazeux.

L'ensemble des dimensions du domaine de calcul et des résultats sont normalisés par les propriétés de la flamme laminaire gazeuse stœchiométrique de référence (cf Tab 3.2) : épaisseur δ_f , vitesse u_f , temps caractéristique τ_f et taux de réaction w_{ref} . Le domaine a une longueur totale $L_1/\delta_f = 205.22$ qui a été discrétisée en 1025 noeuds. Les équations complètes monodimensionnelles de l'aérothermochimie sont résolues et couplées avec le solveur Lagrangien de la phase liquide. Dans un premier temps l'ensemble du système Lagrangien décrit au chapitre 1 a été implémenté. Malgré l'apparente simplicité de la configuration, de nombreux phénomènes complexes d'instabilités de combustion sont apparus. Afin de pouvoir déterminer l'origine de ces phénomènes, le modèle Lagrangien a été très simplifié. Un contrôle parfait de la phase liquide a été appliqué. Afin de déterminer l'origine des oscillations de combustion, les gouttes ont été fixées à leur position initiale. Ainsi, elle ne réagissent plus à l'expansion des gaz qui pouvait les repousser et former des groupes non-homogènes. De plus, le modèle d'indexation sur la température (IAT) a été utilisé afin de pouvoir évaluer l'effet de la variation du temps d'évaporation par rapport au temps de flamme. Dans un cas pratique, il faudrait changer de combustible afin de pouvoir effectuer cette analyse mais d'autres paramètres changeraient aussi et il serait très difficile d'attribuer tel ou tel phénomène au seul délai d'évaporation. Un modèle simplifié a donc été utilisé où les gouttes sont considérées comme des termes sources locaux de combustible gazeux dépendant de la température des gaz environnants. Une goutte a été placée au centre de chaque maille du domaine et sa taille détermine la richesse liquide initiale du calcul.

Les caractéristiques de base des calculs sont répertoriées dans le tableau 3.3. Trois cas ont été choisis de sorte que deux paramètres soient variables : la richesse liquide initiale Φ_L et le temps d'évaporation des gouttes τ_v . Le premier cas (**PHI1-TVAP2**) a une richesse liquide Φ_L

Paramètres	Valeurs
δ_f	$0.1224\delta_0$
u_f	$1.399e^{-2}u_0$
τ_f	$8.744\delta_0/u_0$
w_{ref}	$3.880u_0^3/\delta_0$

TAB. 3.2 – *Caractéristiques de la flamme gazeuse 1D laminaire stœchiométrique de référence.*

pris égale à 1 afin de pouvoir comparer cette simulation à la flamme gazeuse de référence. Le temps d'évaporation τ_v est choisi petit, ce qui permet d'étudier l'effet d'une évaporation très rapide des gouttes sur la propagation de la flamme. Les deux derniers cas (**PHI148-TVAP5**, **PHI148-TVAP8**) ont la même richesse liquide Φ_L afin de voir si l'on retrouve le même comportement que pour les flammes gazeuses (pour la vitesse, le taux de réaction . . .) mais des temps d'évaporation différents, ceci afin d'analyser l'effet de τ_v sur la vitesse de propagation de la flamme, puisque la quantité de combustible évaporé ne sera pas être la même.

3.4.2 Mise en régime

La mise en régime des flammes étudiées dans cette section peut se décomposer en deux ou trois étapes selon que la flamme parvienne ou non à avancer en pulsant de façon régulière. En effet, si la flamme ne parvient pas à se stabiliser, la mise en régime se décompose en deux étapes. Par contre, si la flamme atteint un état "stationnaire" alors nous pouvons observer trois étapes.

L'initialisation des flammes présentées dans cette section est identique : une flamme gazeuse prémélangée stœchiométrique se propage dans une région où il n'y a pas de combustible liquide. La planche P3.4. représente l'évolution de la position de la flamme en fonction du temps pour les trois cas **PHI148-TVAP5**, **PHI148-TVAP8** et **PHI1-TVAP2**. Nous pouvons remarquer que dans les trois cas, la courbe d'évolution de la position de la flamme conserve une pente constante dans la zone 1, ce qui correspond bien à une vitesse de flamme stationnaire. Il est à noter que la pente est négative car l'axe des abscisses est dirigé vers la droite.

Dès que la flamme se rapproche des premières gouttes, celles-ci commencent à s'évaporer et un changement brutal intervient au niveau du taux de réaction qui diminue fortement du fait

du déficit en combustible. Ensuite, un front d'évaporation se met en place, ce qui permet à la flamme d'avancer en oscillant. La flamme avance mais de façon irrégulière, sans arriver à se stabiliser, ce qui correspond à la zone 2. Ce comportement est confirmé planche P3.4. où nous pouvons voir que la courbe d'évolution de la position de la flamme n'est plus une droite. La flamme continue donc à se propager mais sa vitesse n'est plus du tout constante.

Ensuite, si la compétition entre le taux d'évaporation des gouttes et la consommation de combustible gazeux par la flamme arrive à s'équilibrer, alors la flamme se propage de façon régulière, ce qui correspond à la zone 3. Toutefois, la flamme avance en pulsant, mais les pulsations que nous observons dans cette zone (planche P3.4., figures (a),(b)) sont périodiques alors qu'elles ne l'étaient pas dans la zone 2. Une vitesse moyenne de la flamme spray peut alors être déterminée. Si par contre l'équilibre entre l'évaporation et la consommation de combustible évaporé ne se s'établit pas (cf planche P3.4., figure (c)) alors les pulsations restent irrégulières et la flamme ne se propage pas de manière 'stationnaire'.

Nous avons observé deux comportements possibles de la flamme lorsqu'elle se propage dans un spray : l'un où la flamme ne se stabilise pas et l'autre où la flamme parvient à se propager en pulsant de façon périodique.

3.4.3 Résultats

Il est possible de discerner deux phases dans les calculs. En premier lieu, la flamme initialement issue d'un combustible purement gazeux atteint la zone où les gouttes ont été déposées (fig. 3.4-étape 2). Ces dernières vont commencer à s'évaporer. Dès que le mélange oxydant/vapeur de combustible a un niveau suffisant, la flamme reprend sa progression avec cette fois-ci un temps de mise en régime nécessaire à l'établissement d'un front d'évaporation puis de combustion. Ensuite, un état stable est atteint et l'analyse peut débuter.

Dans un premier temps, une brève description de la mise en régime est effectuée. Ensuite la structure des flammes observées est décrite, notamment au niveau de la fraction de mélange qui, comme nous l'avons précisément décrit dans le chapitre dédié à la chimie, est censée être constante au travers d'une flamme prémélangée. Nous verrons que ce n'est plus le cas pour les flammes diphasiques. Pour terminer, l'analyse des régimes de combustion qui ont pu être observés est effectuée en fonction des différentes caractéristiques du spray (richesse liquide

Variable	PHI1-TVAP2	PHI148-TVAP5	PHI148-TVAP8
Φ_L	1	1.48	1.48
τ_v	$\tau_f/10$	$1.5 * \tau_f$	$4 * \tau_f$
Φ_G/Φ_L	0.859	0.1003	0.0176
V_f/u_f	0.4268	0.3444	0.3327
$V_f/V_g(\Phi_L)$	0.4268	0.7845	0.7575
Y_F	0.01169	0.00945	0.00172
Y_O	0.31204	0.31745	0.30848
Z	0.05395	0.0516	0.0449
W_{max}/w_{ref}	0.30699	0.2145	0.1645
Période		7.87	7.77

TAB. 3.3 – *Caractéristiques des différentes simulations pulsées. Toutes les données sont des valeurs moyennes relevées au niveau du maximum du taux de réaction.*

initiale, temps d'évaporation).

3.4.4 Caractéristiques des flammes

Les caractéristiques principales des trois simulations présentées dans cette partie sont rassemblées dans le tableau 3.3. Nous pouvons remarquer que dans les trois cas, la richesse gazeuse locale moyenne Φ_G est inférieure à la richesse liquide initiale Φ_L . Ceci s'explique par le fait que les gouttes ne s'évaporent pas instantanément et donc, du fait de la dilatation des gaz provoquée par l'élévation de la température, une partie du gaz s'échappe de la zone de flamme en même temps que l'oxydant. De plus, les gouttes ayant un temps d'évaporation assez long (**PHI148-TVAP5**, **PHI148-TVAP8**) finissent de s'évaporer derrière le front de flamme, ce qui contribue à avoir une richesse gazeuse locale très faible. Les valeurs des fractions massiques de combustible gazeux Y_F et d'oxydant Y_O ainsi que la fraction de mélange confirment que la flamme brûle en régime pauvre (cf Tab 3.3). D'après ces valeurs, le cas se rapprochant le plus de la flamme stœchiométrique de référence est donc le cas **PHI1-TVAP2**. Cependant, le taux de réaction maximum moyen ne le confirme pas puisqu'il représente environ trente pour cent de celui de la flamme prémélangée de référence. Pour les deux cas riches, le même constat peut être fait concernant le taux de réaction W_{max} . La quantité de combustible évaporée n'est donc pas suffisante pour alimenter la flamme et permettre une vitesse de propagation constante.

La vitesse de propagation de flamme est elle aussi inférieure à la vitesse de référence u_f , ce qui est logique puisque la richesse gazeuse Φ_G est plus faible. De plus, pour les deux cas riches, la vitesse de propagation de la flamme V_f est proche de la vitesse de la flamme gazeuse $V_g(\Phi_L)$ de richesse Φ_L , puisque V_f atteint 75% de la vitesse de la flamme gazeuse $V_g(\Phi_L)$, alors que dans le cas stœchiométrique ($\Phi_L = 1$), la flamme se propage deux fois plus lentement que la flamme gazeuse correspondante. Ce résultat n'est pas étonnant dans la mesure où dans le cas stœchiométrique **PHI1-TVAP2**, la flamme ne parvient pas à se propager de façon stationnaire alors que pour les cas riches, la flamme pulse de manière régulière. Nous pouvons remarquer que la période des pulsations est plus petite dans le cas où le temps d'évaporation des gouttes est long (**PHI148-TVAP8**). La flamme consomme donc plus rapidement le combustible évaporé. Cependant, sa vitesse de propagation n'est pas plus rapide car la quantité de combustible qui s'évapore est plus faible dans le cas **PHI148-TVAP8** par rapport au cas **PHI148-TVAP5**.

Une étude plus approfondie est donc nécessaire pour comprendre en détail les mécanismes de propagation de cette flamme.

3.4.5 Comportement et structure des flammes pulsées

Comme nous l'avons vu précédemment, la propagation de la flamme se fait soit en pulsant de manière régulière soit en pulsant de façon désordonnée. Les planches-P3.5. et P3.8. sont des zooms de la zone 3 présentée dans la section précédente, pour les cas **PHI148-TVAP5** et **PHI148-TVAP8**. La figure (a) de chacune de ces planches représente l'évolution temporelle du taux de réaction maximum. Le taux de réaction $\dot{w}_e$ caractérise la zone du domaine où la combustion a lieu et la position du maximum de $\dot{w}_e$ correspond à la position où la flamme brûle le plus. Nous pouvons constater que les pulsations du taux de réaction maximum qui représentent le comportement de la flamme (cf figure (a) de chaque planche) sont bien périodiques alors que pour le dernier cas **PHI1-TVAP2** (cf planche P3.11.) les oscillations du taux de réaction maximum sont totalement désordonnées.

Intéressons nous tout d'abord aux flammes pulsées périodiques. En regardant l'évolution du taux de réaction maximum (**TRM**) sur les planches P3.5.a et P3.8.a, nous remarquons que le comportement de ces flammes n'est pas identique même si les pulsations de chacune d'elles sont périodiques. En effet, dans le premier cas, nous observons deux pics du maximum du taux

de réaction sur une période alors que dans le second cas, il n'y a qu'un seul pic. Le seul paramètre qui diffère entre ces deux cas étant le temps d'évaporation τ_v des gouttes, nous pouvons en déduire que τ_v est à l'origine de la différence de comportement entre ces deux flammes. Le mécanisme de propagation n'est donc pas le même dans ces deux cas de figure et une étude détaillée de chacun de ces cas est proposée afin de comprendre les phénomènes qui interviennent.

Dans le cas **PHI148-TVAP5** où deux pics du taux de réaction maximum sont observés, nous pouvons décomposer la période des pulsations du TRM en cinq étapes indiquées sur chacune des figures de la planche P3.5. par des traits verticaux. Détaillons chacun de ces moments :

- **Instant A :** le taux de réaction maximum est très faible (cf planche P3.5.a), car il n'y a quasiment plus de combustible gazeux dans la zone où se trouve la flamme. En effet, sur la planche P3.5.d, le produit $Y_F * \Phi_s$ nous montre qu'il reste une quantité trop faible de combustible gazeux pour que la flamme puisse brûler. La fraction de mélange Z nous confirme que la flamme brûle en régime pauvre puisqu'elle vaut 50% de la fraction de mélange stœchiométrique ($Z_{stoe} = 0.0625$). Par conséquent, la température au niveau de la flamme atteint à ce moment là un niveau faible (cf planche P3.5.e), qui correspond à la valeur minimale de la température de la flamme. Cependant, même si la flamme est quasiment éteinte, le taux d'évaporation est en train d'augmenter du fait de la diffusion de la température vers les gouttes (cf planche P3.5.b), cela va ainsi alimenter la flamme en combustible gazeux. Nous pouvons d'ailleurs remarquer, si nous regardons l'évolution des positions du front d'évaporation et du front de flamme, que ce dernier se rapproche du front d'évaporation (cf figure P3.5.f). La flamme va donc à nouveau être alimentée en combustible et le taux de réaction va augmenter brutalement jusqu'à un niveau égal voir supérieur à celui de la température adiabatique. Ce dépassement de la température est dû au préchauffage du mélange avant le réallumage.
- **Instant B :** le front de flamme s'est rapproché du front d'évaporation qui continue de progresser dans le domaine, jusqu'à être confondu avec lui (cf planche P3.5.f). Le taux d'évaporation est alors maximum (premier pic), tout comme le taux de réaction maximum (cf planches P3.5.a et P3.5.b), qui est légèrement supérieur au taux de réaction de la flamme stœchiométrique de référence. Par conséquent, la température de la flamme

augmente fortement par rapport à l'instant A (cf planche P3.5.c), ce qui explique aussi l'augmentation du taux d'évaporation jusqu'à la disparition de la phase liquide locale. La flamme consomme quasi instantanément le mélange gazeux obtenu, qui est très proche de la stœchiométrie ($Z \simeq 0.0675$), ce qui explique le fort TRM. Comme le mélange gazeux est riche, il reste du combustible non brûlé dans les gaz chauds lorsque la flamme avance.

- **Instant C** : le TRM de la flamme chute brusquement (cf planche P3.5.a) et le front de flamme recule dans une région du domaine où il n'y a plus de goutte (cf planche P3.5.f). Cependant, comme nous pouvons le voir sur la planche P3.5.d, il reste du combustible gazeux mais peu d'oxydant, le mélange restant dans cette zone est donc riche (cf planche P3.5.e). Le taux de réaction maximum de la flamme est alors peu élevé. D'autre part, le front de flamme ayant reculé, la température au niveau du front d'évaporation est moins élevée et par conséquent, le taux d'évaporation diminue également (cf planche P3.5.b), et le front d'évaporation n'avance plus (cf planche P3.5.f).
- **Instant D** : le TRM est à nouveau élevé, mais ce second pic est d'intensité plus faible que le premier pic correspondant à l'instant B (planche P3.5.a). En effet, le taux de réaction maximum est environ 80% de celui de la flamme de référence. De plus, la position de ce front de flamme est la même par rapport à l'instant C (cf planche P3.5.f), la flamme n'a donc pas réussi à avancer et reste bloquée dans une région éloignée du front d'évaporation. D'autre part, les fractions massiques de combustible et d'oxydant ont changé (planche P3.5.d). Les modifications dans les quantités de combustible et d'oxydant sont dûes au phénomène de dilatation, qui pousse les gaz situés au niveau du front d'évaporation vers la flamme, ce qui lui permet de continuer à brûler.
- **Instant E** : Le front de flamme avance pour rejoindre le front d'évaporation (cf planche P3.5.f), mais comme le taux d'évaporation était quasiment nul, il ne reste presque plus de combustible (planche P3.5.d) et par conséquent le TRM de la flamme chute à nouveau (planche P3.5.a). Toutefois, comme le front de flamme se rapproche des gouttes, la diffusion de la température leur permet de s'évaporer et donc le taux d'évaporation maximum augmente à nouveau. Le cycle se reproduit et nous nous retrouvons dans les mêmes conditions qu'à l'instant A , à savoir une forte augmentation du TRM.

Le comportement de la flamme durant une période a donc été décrit pour le cas **PHI148-TVAP5**. Celui-ci peut être retrouvé sur la planche P3.6.a qui représente l'évolution du taux d'évaporation maximum en fonction du taux de réaction maximum, relevée pour la même période que la planche P3.5.a. Nous pouvons noter que le phénomène périodique que nous avons observé que la planche P3.5., se retrouve parfaitement ici. Les cinq instants étudiés précédemment ont été reportés sur cette courbe et nous constatons que la flamme se conduit toujours de manière identique, mais qu'elle ne brûle pas toujours dans les mêmes conditions. En effet, nous pouvons remarquer que les deux pics du TRM se produisent dans des conditions d'évaporation différentes, à savoir un premier pic *B* avec un fort taux d'évaporation maximum car le front de flamme est confondu avec le front d'évaporation et un second pic *D* avec un faible taux d'évaporation maximum car la flamme s'est éloignée du front d'évaporation et la température dans la zone où se trouvent les gouttes n'est pas suffisante pour permettre leur évaporation. Nous avons ensuite l'instant *C*, qui se situe entre les deux pics du TRM, avec un faible taux de réaction maximum mais avec un taux d'évaporation maximum qui a diminué par rapport à l'instant *B* car la flamme s'est éloignée du front d'évaporation. Enfin, les caractéristiques des instants *A* et *E* sont identiques car ils correspondent au début d'une période de pulsations du TRM, où la flamme brûle peu mais où le taux d'évaporation recommence à augmenter.

D'autre part, le comportement de cette flamme est complètement différent de celui d'une flamme gazeuse prémélangée. Sur la planche P3.6.b qui représente le taux de réaction maximum en fonction de la fraction de mélange au niveau du TRM sur le laps de temps étudié, nous pouvons voir que la fraction de mélange ne reste pas constante à travers la flamme, comme c'est le cas pour une flamme prémélangée. En effet, la flamme peut brûler en régime pauvre comme en régime riche, ce qui est conditionné par la valeur du taux d'évaporation des gouttes car ce sont ces dernières qui alimentent la flamme en combustible gazeux. De ce fait, le TRM ne parvient pas à rester constant. Sur les planches P3.6.c et P3.6.d qui représentent respectivement les fractions massiques de combustible et d'oxydant au niveau du TRM en fonction de la fraction de mélange, le comportement du TRM est retrouvé puisque les valeurs de Y_F et de Y_O nous indiquent que la flamme ne brûle jamais dans les mêmes conditions. Une étude plus détaillée de la structure de flamme est donc nécessaire.

Sur la planche P3.7. sont représentés les profils instantanés des différents paramètres relevés le plus près possible des 5 instants étudiés précédemment. Si nous observons le profil du taux de réaction, planche P3.7.a, pour les instants B et D , nous remarquons que la flamme a une structure très particulière. En effet, cette flamme a une structure de flamme double, composée tout d'abord d'un front de flamme prémélangé situé devant les gouttes et ensuite, une flamme de diffusion qui est alimentée par les gaz non-brûlés par la flamme prémélangée.

La planche P3.7.e représente les profils de la fraction massique de combustible normalisée et de celle d'oxydant pour les cas B et D . Dans les deux cas, nous avons tout d'abord les profils de $Y_F * \Phi_s$ et Y_O qui évoluent de manière identique ($62.3 < X < 64.8$), ce qui correspond bien à la structure d'une flamme prémélangée. Ensuite, derrière cette flamme prémélangée, brûle une flamme de diffusion, comme le montre l'inversion de pente de la courbe d'oxydant. Cependant, cette flamme de diffusion n'a pas la même structure aux deux instants B et D qui correspondent, rappelons-le, aux deux pics observés pour une période du TRM. A l'instant B où le front de flamme et le front d'évaporation sont confondus, le signe du gradient d'oxydant est inverse au gradient restant de carburant, et la combustion passe d'un régime prémélangé à un régime non-prémélangé. Il reste donc peu ou pas de combustible derrière la flamme prémélangée mais encore beaucoup d'oxydant. Par contre, à l'instant D , qui correspond au moment où le front de flamme et le front d'évaporation sont éloignés l'un de l'autre, c'est le signe du gradient de combustible qui est inverse au gradient restant d'oxydant. Il reste alors peu d'oxydant et beaucoup de carburant. Il y a ainsi deux types de flammes doubles qui apparaissent alternativement, selon que la flamme soit proche ou non du front d'évaporation : la première correspondant au pic principal du TRM, composée d'une flamme prémélangée et d'une flamme de diffusion pauvre en combustible (cf Fig 3.5, cas 1) et la seconde correspondant au pic secondaire du TRM, composée d'une flamme prémélangée et d'une flamme de diffusion pauvre en oxydant (cf Fig 3.5, cas2). Nous pouvons remarquer que ces deux types de flamme se retrouvent également quand le TRM est faible (cf planche P3.7.a) mais que ce n'est plus une flamme double. En effet, comme cela a été mentionné précédemment, ces deux flammes sont éloignées l'une de l'autre car la flamme de diffusion s'est détachée de la flamme prémélangée, et contrairement aux cas où le régime de la flamme prémélangée est stœchiométrique, la flamme brûle en régime pauvre (A et E) ou riche (C). De plus, si cette flamme brûle en régime pauvre (en combustible) alors la

flamme de diffusion est pauvre en oxydant et si elle brûle en régime riche alors la flamme de diffusion est pauvre en carburant (cf planche P3.7.c et P3.7.f).

Ainsi, le taux de réaction peu élevé s'explique par la quantité de combustible gazeux soit trop faible, soit trop importante dans la zone de la flamme à ces moments là. Néanmoins, sur la planche P3.7.b qui représente les profils du taux d'évaporation, nous remarquons que pour les cas où le TRM est faible, les gouttes continuent à s'évaporer mais comme le front d'évaporation est loin de la flamme, il faut attendre que le phénomène de diffusion provoqué par l'élévation de la température (cf planche P3.7.d) apporte du combustible et de l'oxydant au niveau de la flamme pour que le mélange soit plus proche de la stœchiométrie et qu'elle puisse brûler à nouveau.

Si nous observons planche P3.8. le comportement de la flamme dans le cas **PHI148-TVAP8**, nous constatons qu'il est similaire à celui présenté précédemment à la seule différence que le cycle des pulsations du taux de réaction maximum ne comporte plus qu'un seul pic. En effet, le pic secondaire a disparu au profit du pic principal et nous pouvons noter que le temps durant lequel le TRM reste élevé est plus long que dans le cas **PHI148-TVAP5**. Ce cycle a donc été décomposé en quatre étapes qui sont indiquées sur la planche P3.8.a qui représente l'évolution temporelle du TRM. Reprenons chacune de ces étapes :

- **Instant A :** La flamme est quasiment éteinte (le TRM est très faible, cf planche P3.8.a), car il ne reste presque plus de combustible (cf planche P3.8.d). Comme le front de flamme se rapproche du front d'évaporation (cf planche P3.8.f), la température au niveau de ce dernier augmente. De ce fait, le taux d'évaporation est en train d'augmenter (cf planche P3.8.b).
- **Instant B :** Le TRM a augmenté brusquement et il est à présent maximal. Cependant, celui-ci est plus faible que dans le cas **PHI148-TVAP5**, car le mélange est pauvre (cf planche P3.8.e) alors que dans le cas précédant la combustion a lieu à la stœchiométrie (cf planche P3.5.e). Cette différence est due au temps d'évaporation des gouttes qui est plus long dans ce cas-ci (cf TAB 3.3), et donc la quantité de combustible évaporé est plus faible (environ 50% du cas précédent). D'autre part, lorsque le TRM est maximum, ce qui est à ce moment là, également le cas pour le taux d'évaporation maximum, le front de flamme est en avance sur le front d'évaporation (cf planche P3.8.f).

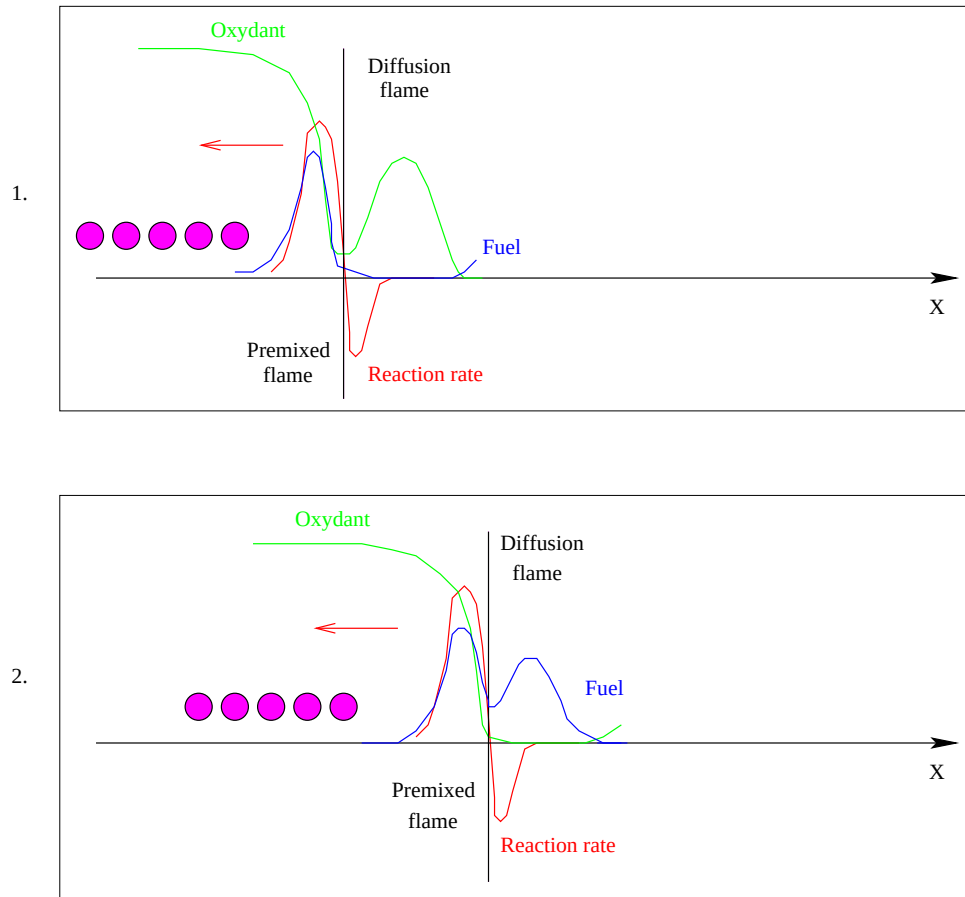


FIG. 3.5 – Schéma du comportement d'une flamme double. La flamme passe alternativement de l'état 1 à l'état 2.

- **Instant C:** Le TRM diminue fortement (cf planche P3.8.a), car le taux d'évaporation maximum a chuté lui aussi et il est même nul (cf planche P3.8.b). Les gouttes ne s'évaporent donc plus et par conséquent, il ne reste quasiment plus de combustible et le front de flamme recule et repasse derrière le front d'évaporation puis il s'éloigne.
- **Instant D:** Le TRM a atteint de nouveau son niveau minimum (correspondant à l'instant A) mais le front de flamme se rapproche des gouttes (cf planche P3.8.f). Grâce au phénomène de diffusion, ceci entraîne une augmentation de la température dans la région des gouttes et elles recommencent à s'évaporer (cf planche P3.8.b), ce qui va alimenter la flamme en combustible.

Le comportement de la flamme dans le cas **PHI148-TVAP8** diffère donc peu du cas **PHI148-TVAP5**. Tout comme dans le premier cas, nous retrouvons bien sur la planche P3.9.a un comportement cyclique, avec le taux d'évaporation maximum et le TRM qui augmentent simultanément. Inversement, quand le TRM diminue, le taux d'évaporation baisse aussi. D'autre part, sur la planche P3.9.b qui représente l'évolution du TRM dans l'espace de la fraction de mélange, nous remarquons comme dans le cas **PHI148-TVAP5** que la flamme ne se comporte pas comme une flamme prémélangée pour laquelle la fraction de mélange reste constante à travers la flamme. En effet, la flamme brûle essentiellement en régime pauvre, contrairement au cas **PHI148-TVAP5** où la flamme brûle en régime pauvre ou riche, sans prédominance particulière. Le fait que la flamme brûle en régime pauvre explique pourquoi le TRM est plus faible que dans le cas **PHI148-TVAP5**. Le régime de combustion est quelque fois stœchiométrique mais il correspond aux moments où il reste à la fois peu de combustible et de comburant. Les valeurs des fractions massiques de combustible et d'oxydant relevées au niveau du TRM, représentées dans l'espace de la fraction de mélange (cf planches P3.9.c et P3.9.d) confirme bien que le régime de combustion est pauvre.

Enfin, l'étude des profils des différentes variables planche P3.10. confirme que la structure de flamme est comparable à celle du cas **PHI148-TVAP5**. En effet, nous retrouvons une structure de flamme double lorsque le TRM est maximum avec une seconde flamme de diffusion située à l'arrière de la flamme principale (cf planche P3.10.a) et deux flammes (une flamme prémélangée et une flamme de diffusion) distantes l'une de l'autre quand le TRM est faible. Sur la planche P3.10.e, la structure de la flamme est retrouvée avec des profils de combustible et d'oxydant qui évoluent de manière similaire, ce qui correspond à la flamme prémélangée. Nous observons ensuite une inversion du signe du gradient d'oxydant par rapport au gradient restant de combustible, correspondant à la première flamme de diffusion. Derrière cette flamme les signes des gradients d'oxydant et de combustible s'inversent simultanément et une seconde flamme de diffusion apparaît. D'autre part, les profils de température planche P3.10.d expliquent les raisons du comportement du taux d'évaporation. Tout d'abord la température au niveau des gouttes est élevée car les fronts de flamme et d'évaporation sont quasiment confondus, ce qui conduit à un fort taux d'évaporation (cf planche P3.10.b). Ensuite, la température au niveau des gouttes diminue (cf planche P3.10.d) car la flamme recule (cf planche P3.10.a). Cette région est

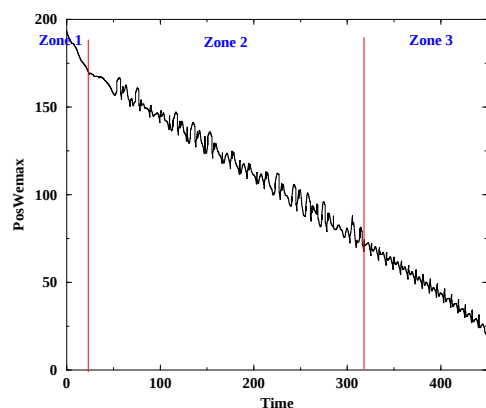
à nouveau à la température des gaz frais, et les gouttes ne s'évaporent donc plus. Ces dernières recommencent à s'évaporer quand la flamme se rapproche d'elles et que la température dans cette région augmente à nouveau.

Pour finir, un dernier cas (**PHI1-TVAP2**) est présenté, où les pulsations du taux de réaction maximum de la flamme sont complètement désorganisées (cf planche P3.11.a). Toutefois, même si les pulsations du taux de réaction maximum n'évoluent pas de façon régulières, ce qui est également le cas pour le taux d'évaporation maximum (cf planche P3.11.b), la flamme tend à avoir le même comportement que celui des deux cas précédemment étudiés. Une des raisons qui peut expliquer cette différence est le choix du temps d'évaporation τ_v des gouttes. τ_v a été pris petit (cf Tab 3.3), les gouttes sont donc très vite évaporées. Le front de flamme n'a même pas le temps d'atteindre le front d'évaporation. En effet, la température dans la région des gouttes augmente rapidement grâce au phénomène de diffusion, ce qui permet aux gouttes de s'évaporer avant que la flamme n'atteigne cette zone (cf planche P3.11.f). De plus, l'évolution de la fraction de mélange au niveau de la flamme (cf planche P3.11.e) confirme le fait que la flamme ait des difficultés pour brûler car le mélange est très souvent trop riche en combustible, ce que nous pouvons vérifier avec les fractions massiques de combustible et d'oxydant planche P3.11.d. D'autre part, contrairement aux deux cas précédents où le comportement cyclique de la flamme est visible quand nous observons l'évolution du taux d'évaporation maximum en fonction du TRM, dans ce cas, planche P3.12.a, le fait que la flamme se propage de manière désorganisée se retrouve parfaitement puisqu'aucun comportement prédominant n'apparaît. Par contre, sur la planche P3.12.b, nous observons le même comportement de flamme que pour le cas **PHI148-TVAP5**, à savoir une fraction de mélange qui n'est pas constante à travers la flamme, et qui peut brûler dans tous les régimes, ce que nous retrouvons planches P3.12.c et P3.12.d.

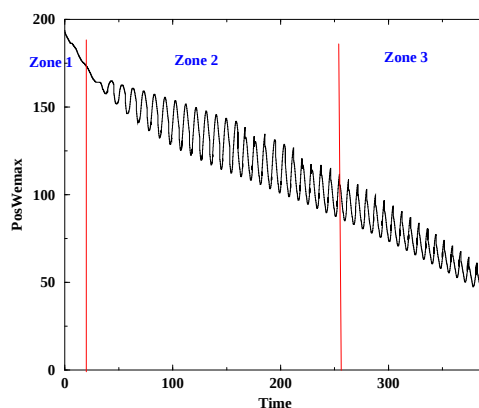
Enfin, nous remarquons que la structure de la flamme n'en est pas moins semblable à celle des deux cas précédents (cf planche P3.13.). Nous observons tout d'abord quand le TRM est élevé, une structure de flamme double composée d'une flamme prémélangée principale et juste derrière d'une flamme de diffusion qui se caractérise par l'inversion du signe du gradient d'oxydant par rapport au gradient restant de combustible (cf planche P3.13.e). Puis, lorsque le TRM est faible, la flamme de prémélange et la flamme de diffusion se séparent (cf planche P3.13.a).

3.4.6 Conclusion

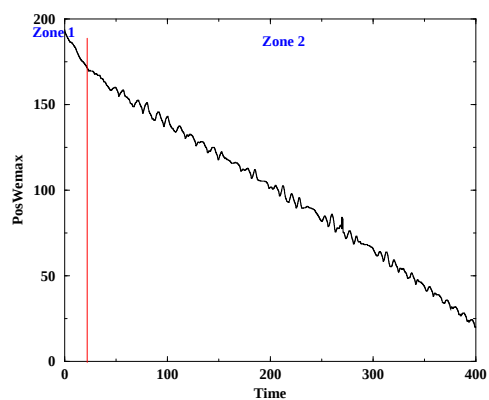
Des simulations numériques directes de la propagation de flammes sprays laminaires ont été réalisées. Le comportement périodique de ces flammes a été mis en évidence avec des pulsations doubles ou simples dépendant du temps d'évaporation des gouttes τ_v choisi. En effet, si $\tau_v \simeq \tau_f$ alors des pulsations doubles (avec deux pics) du taux de réaction maximum apparaissent. Si $\tau_v \gg \tau_f$ alors une pulsation simple (à un seul pic) du taux de réaction maximum s'établit. Ensuite, la structure de ces flammes a été détaillée dans l'espace physique et nous avons pu constater qu'elle était semblable dans tous les cas. Ainsi, lorsque le taux de réaction maximum est élevé alors la flamme a une structure de flamme double et lorsque le taux de réaction maximum est faible alors deux flammes distinctes, une de prémélange et une diffusion située à l'arrière de la flamme prémélangée, brûlent.



(a)

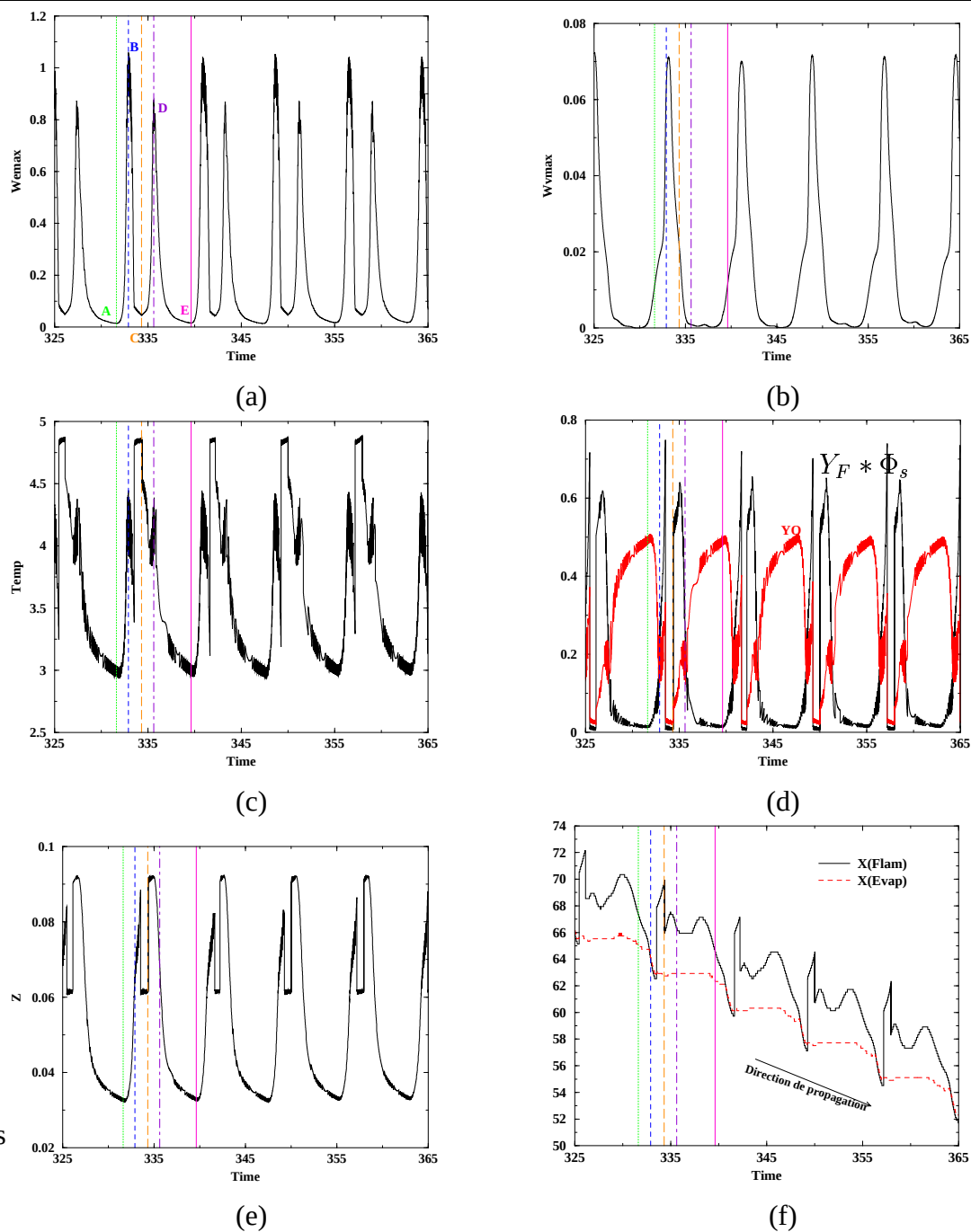


(a')



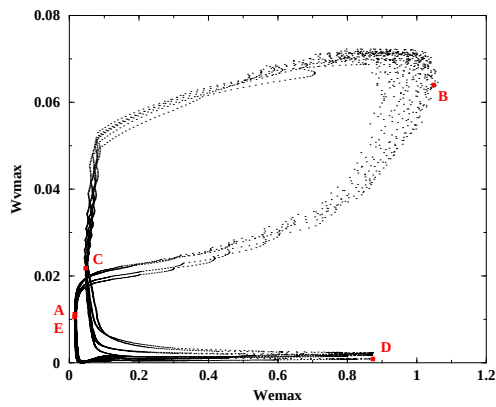
(c)

P3.4. - Evolution temporelle la position du maximum du taux de réaction, pour les trois cas **PHI148-TVAP5**, **PHI148-TVAP8** et **PHI1-TVAP2**.

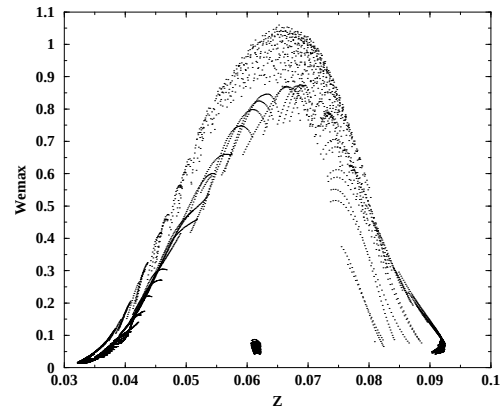


PSfrag replacements

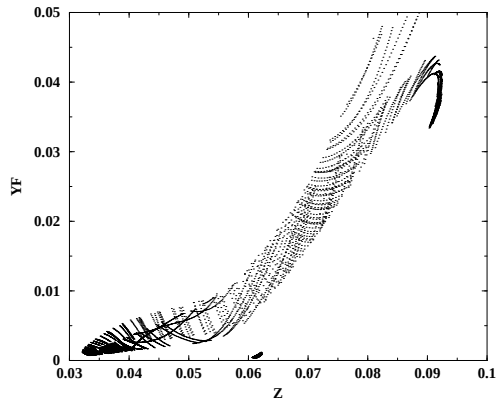
P3.5. - Cas **PHI148-TVAP5**. Evolution temporelle : (a) du taux de réaction maximum, (b) du taux d'évaporation maximum, (c) de la température, (d) de la fraction massique d'oxydant Y_O et du produit fraction massique de combustible- coefficient stœchiométrique, (e) de la fraction de mélange, (f) des positions du taux d'évaporation maximum et du taux de réaction maximum. (c), (d), (e) sont pris au niveau du TRM.



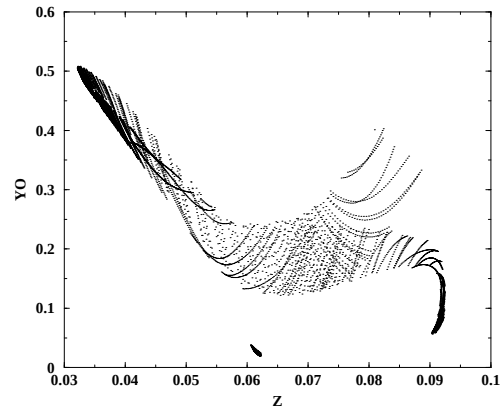
(a)



(b)

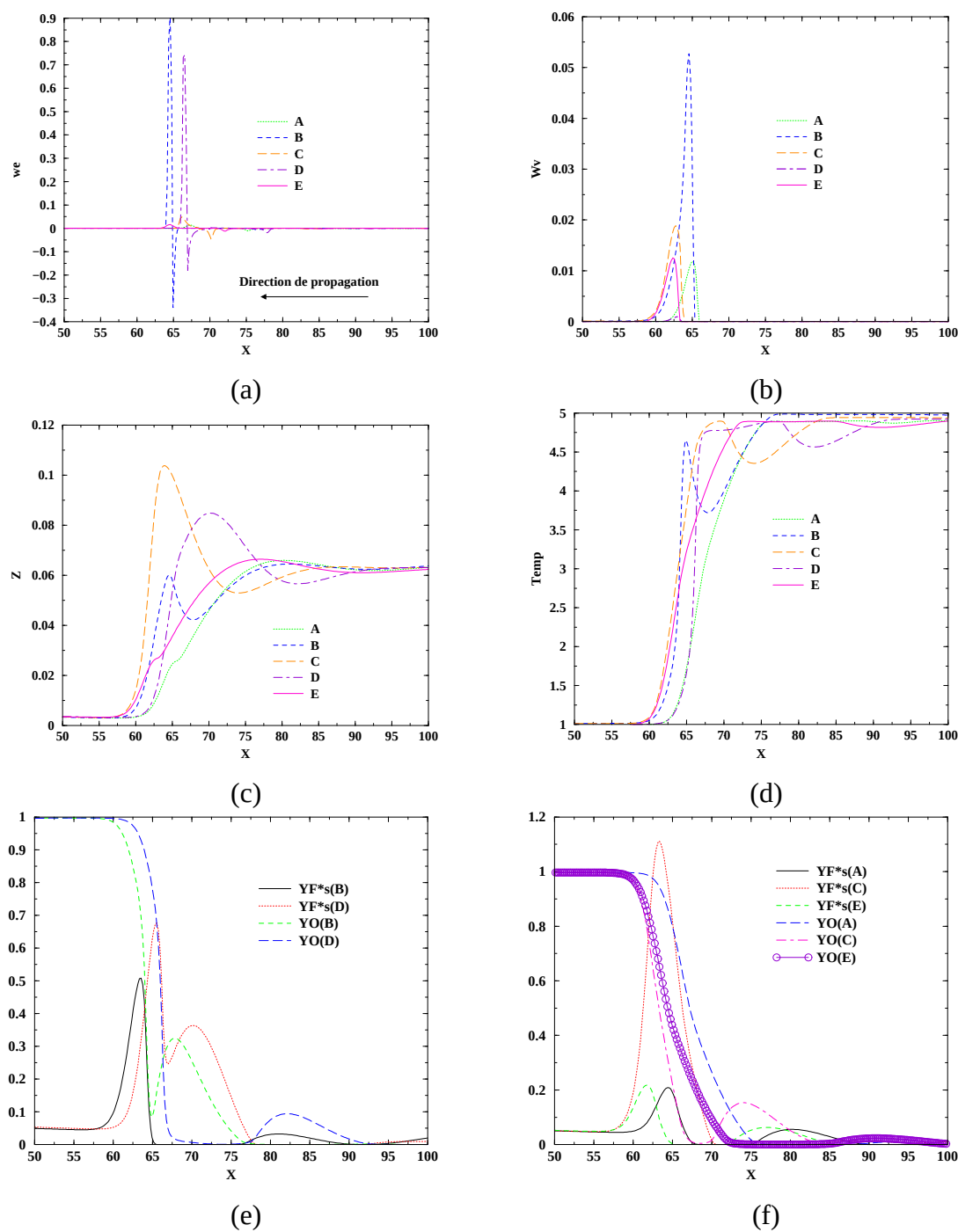


(c)

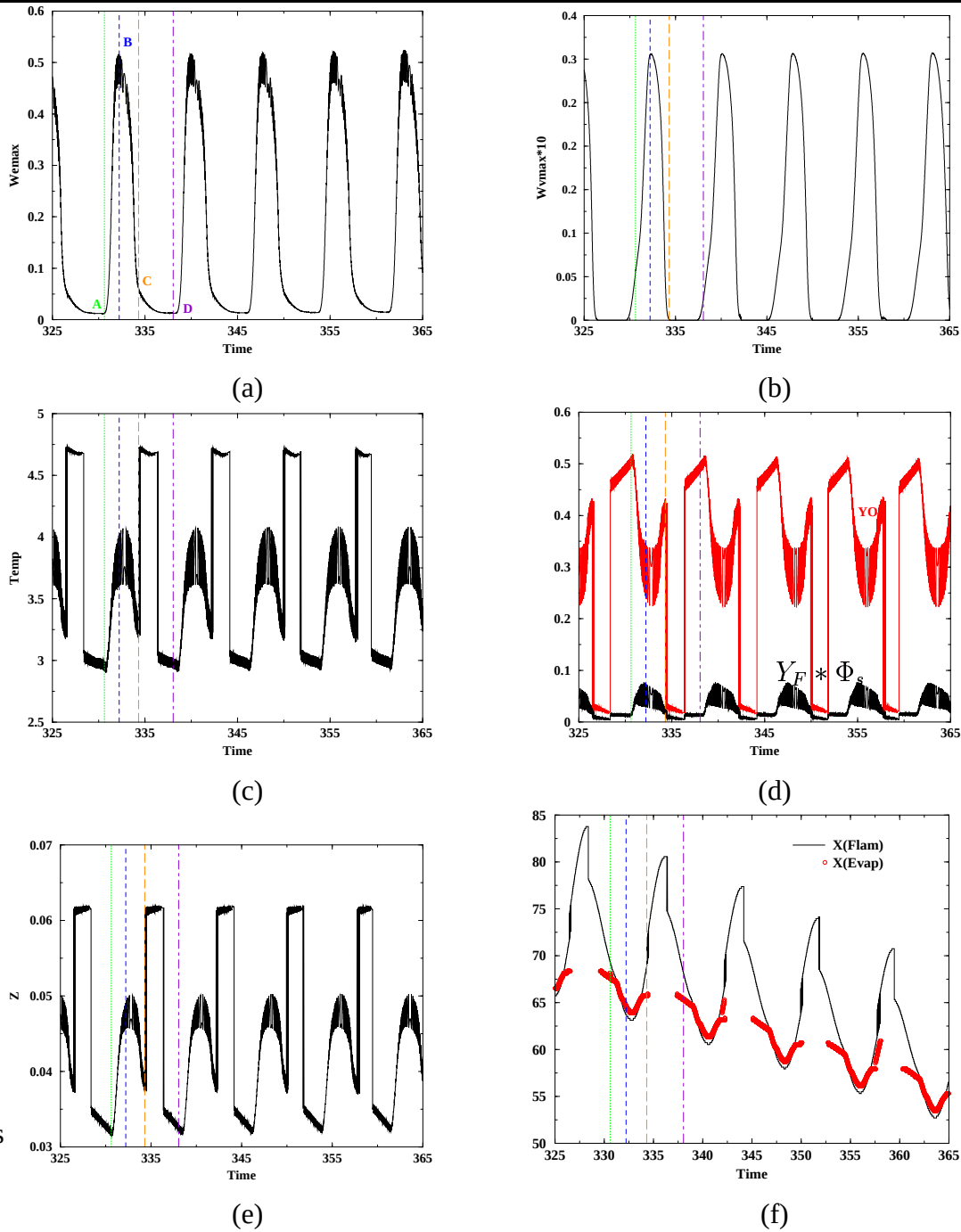


(d)

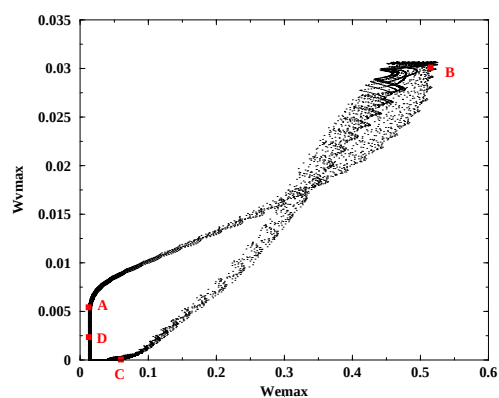
P3.6. - Cas **PHI148-TVAP5**. (a) Evolution du taux d'évaporation maximum en fonction du taux de réaction maximum. (b) Evolution du taux de réaction maximum dans l'espace de la fraction de mélange. (c) et (d) Fractions massiques de combustible et d'oxydant respectivement dans l'espace de la fraction de mélange.



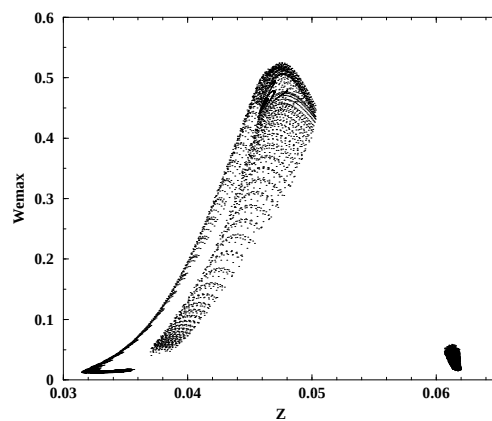
P3.7. - Cas **PHI148-TVAP5**. Profils (a) du taux de réaction (positif: prémélangé, négatif: non-prémélangé), (b) du taux d'évaporation, (c) de la fraction de mélange, (d) de la température, (e) et (f) des fractions massiques de combustible et d'oxydant pris à 5 moments de l'évolution temporelle du maximum du taux de réaction (cf planche P3.5.a).



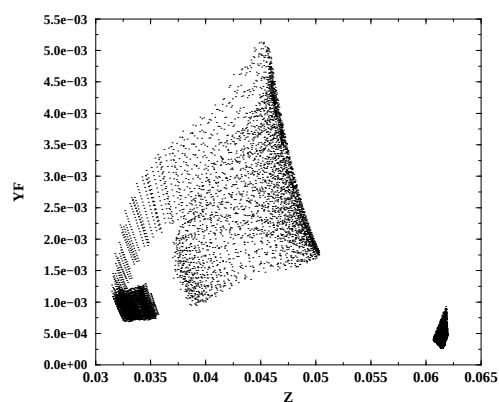
P3.8. - Cas **PHI148-TVAP8**. Evolution temporelle : (a) du taux de réaction maximum, (b) du taux d'évaporation maximum, (c) de la température, (d) de la fraction massique d'oxydant Y_O et du produit fraction massique de combustible-coefficient stœchiométrique, (e) de la fraction de mélange, (f) des positions du taux d'évaporation maximum et du taux de réaction maximum. (c), (d), (e) sont pris au niveau du TRM.



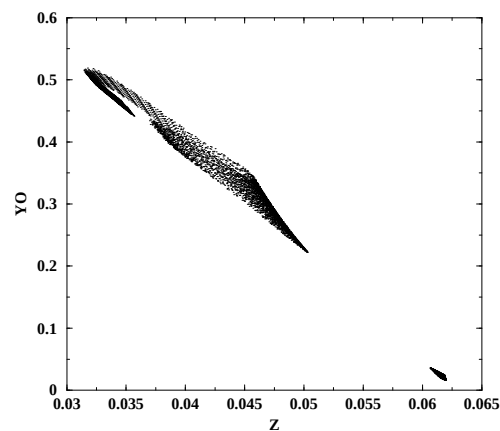
(a)



(b)

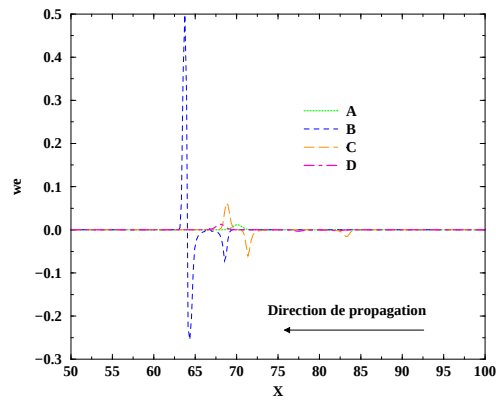


(c)

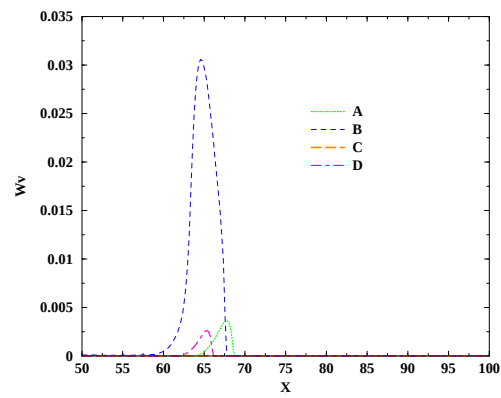


(d)

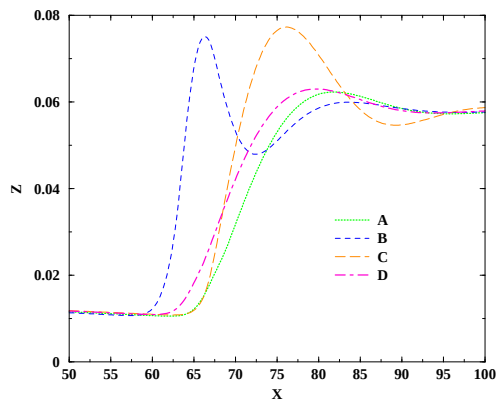
P3.9. - Cas **PHI148-TVAP8**. (a) Evolution du taux d'évaporation maximum en fonction du taux de réaction maximum. (b) Evolution du taux de réaction maximum dans l'espace de la fraction de mélange. (c) et (d) Fractions massiques de combustible et d'oxydant respectivement dans l'espace de la fraction de mélange.



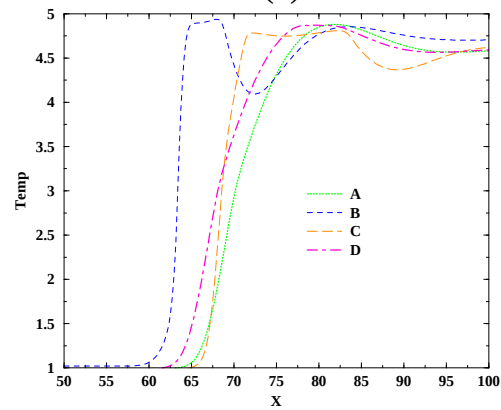
(a)



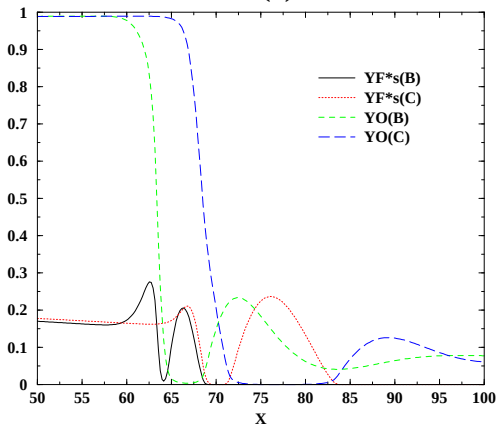
(b)



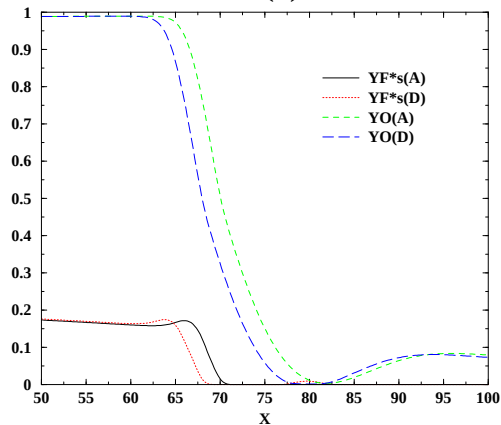
(c)



(d)

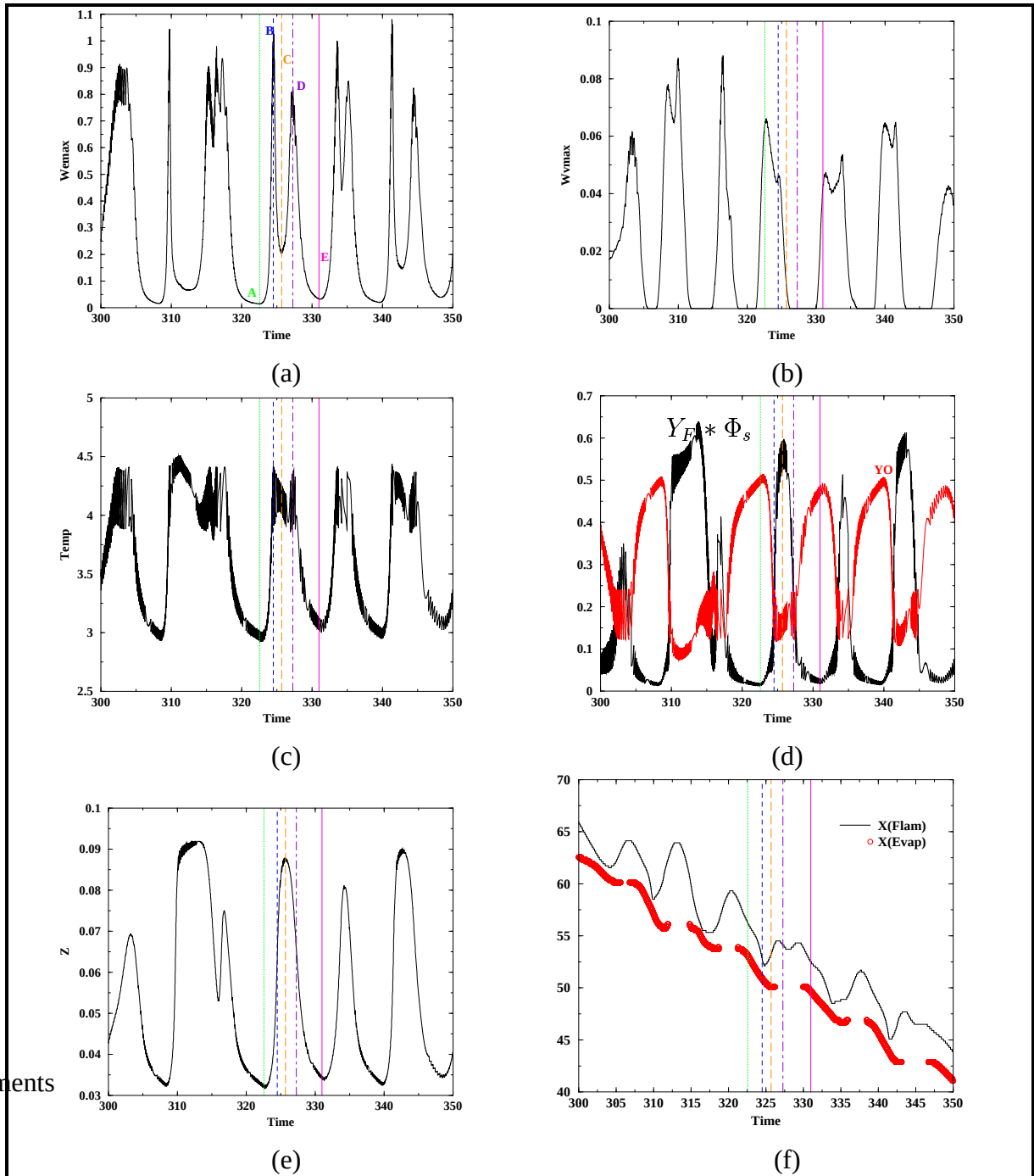


(e)



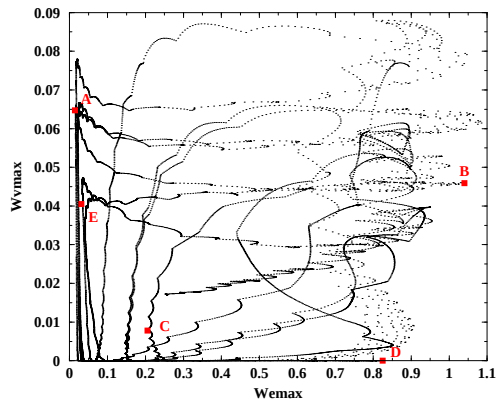
(f)

P3.10. - Cas **PHI148-TVAP8**. Profils (a) du taux de réaction (positif: prémélangé, négatif: non-prémélangé), (b) du taux d'évaporation, (c) de la fraction de mélange, (d) de la température, (e) et (f) des fractions massiques de combustible et d'oxydant pris à 4 moments de l'évolution temporelle du taux de réaction maximum (cf planche P3.8.a).

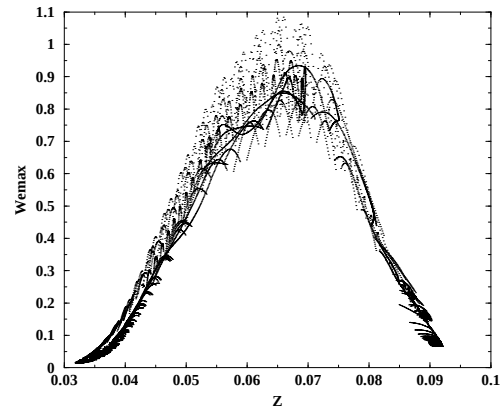


PSfrag replacements

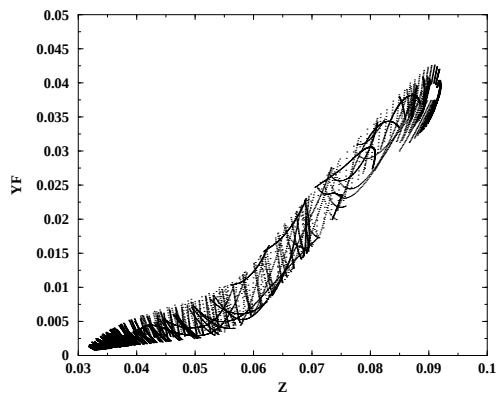
P3.11. - Cas **PHI1-TVAP2**. Evolution temporelle : (a) du taux de réaction maximum, (b) du taux d'évaporation maximum, (c) de la température, (d) de la fraction massique d'oxydant Y_O et du produit fraction massique de combustible- coefficient stœchiométrique, (e) de la fraction de mélange, (f) des positions du taux d'évaporation maximum et du taux de réaction maximum. (c), (d), (e) sont pris au niveau du TRM.



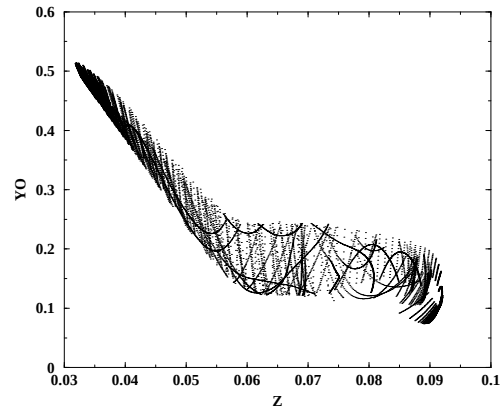
(a)



(b)

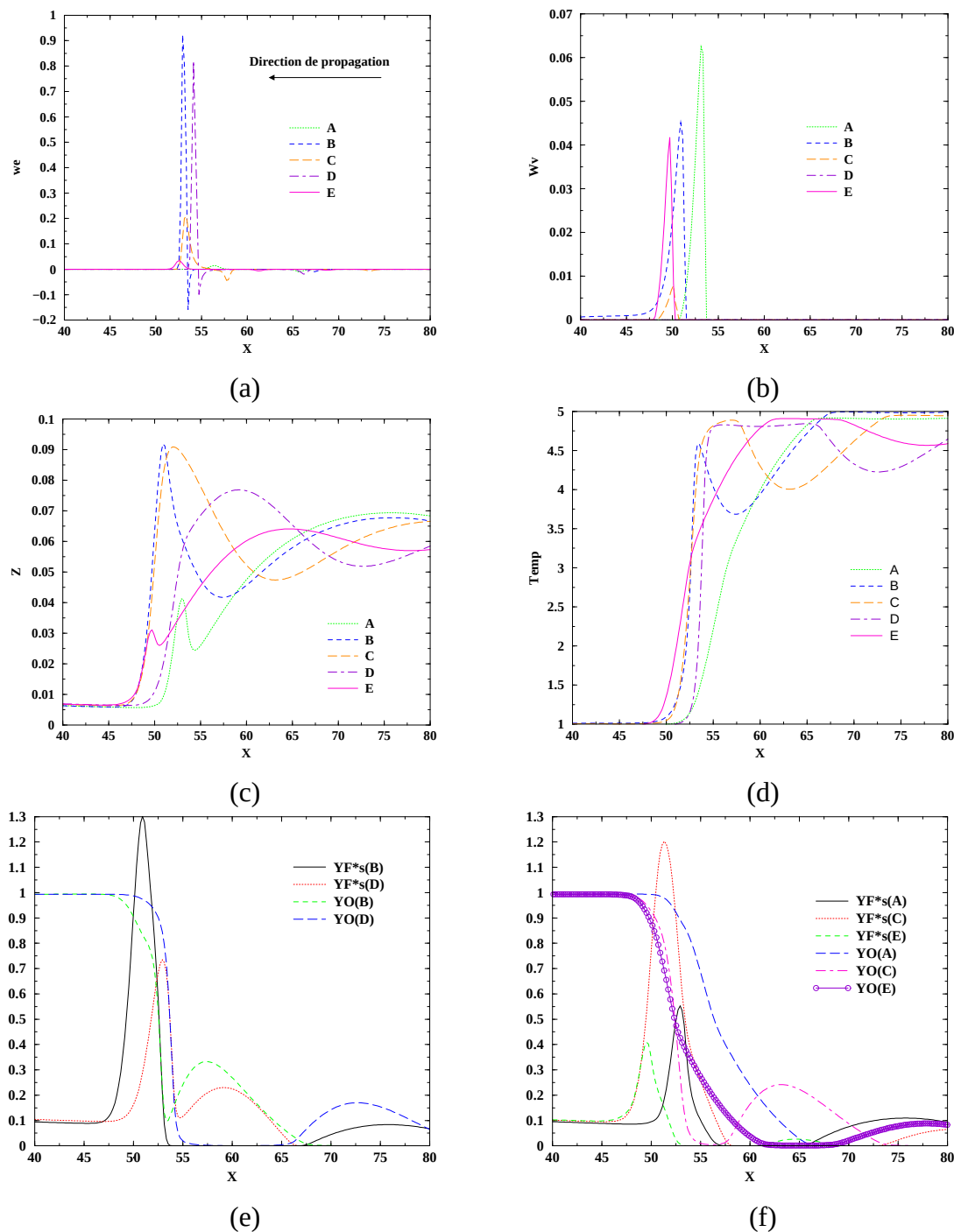


(c)



(d)

P3.12. - Cas **PHI1-TVAP2**. (a) Evolution du taux d'évaporation maximum en fonction du taux de réaction maximum. (b) Evolution du taux de réaction maximum dans l'espace de la fraction de mélange. (c) et (d) Fractions massiques de combustible et d'oxydant respectivement dans l'espace de la fraction de mélange.



P3.13. - Cas **PHI1-TVAP2**. Profils (a) du taux de réaction (positif : prémélangé, négatif : non-prémélangé), (b) du taux d'évaporation, (c) de la fraction de mélange, (d) de la température, (e) et (f) des fractions massiques de combustible et d'oxydant pris à 5 moments de l'évolution temporelle du taux de réaction maximum (cf planche P3.11.a).

Chapitre 4

Flammes sprays turbulentes

4.1 Introduction

La combustion turbulente d'une phase liquide en évaporation est très largement rencontrée dans les systèmes industriels. Toutefois, même si le combustible liquide est complètement atomisé par l'injecteur, de nombreux phénomènes non-linéaires fortement couplés apparaissent. L'écoulement qui est turbulent, mène à de fortes interactions entre un large éventail de fluctuations de vitesse et de tailles de gouttes. La distribution de vapeur de combustible est alors influencée par la dispersion au niveau macro-échelle de la phase liquide, qui est complétée par la diffusion moléculaire au niveau micro-échelle, permettant aux réactifs de se rencontrer dans de fines zones de réaction. Trois questions principales émergent :

- Comment les gouttes sont-elles dispersées et évaporées?
- Comment le mélange turbulent de combustible et d'oxydant est organisé en présence de sources de vapeur locales?
- Quelle est l'influence de ces deux phénomènes sur la structure des flammes?

Il apparaît difficile de résoudre tous ces problèmes en même temps. Pour se concentrer sur certains d'entre eux, des simulations numériques directes sont effectuées. En faisant varier les paramètres de contrôle de la configuration modèle, diverses structures de flammes sont observées et à la vue des résultats obtenus, un diagramme pour la combustion de spray est proposé pour définir les différents régimes de combustion. La connaissance de ces régimes est nécessaire pour relier les propriétés principales des flammes sprays aux caractéristiques de l'atomiseur.

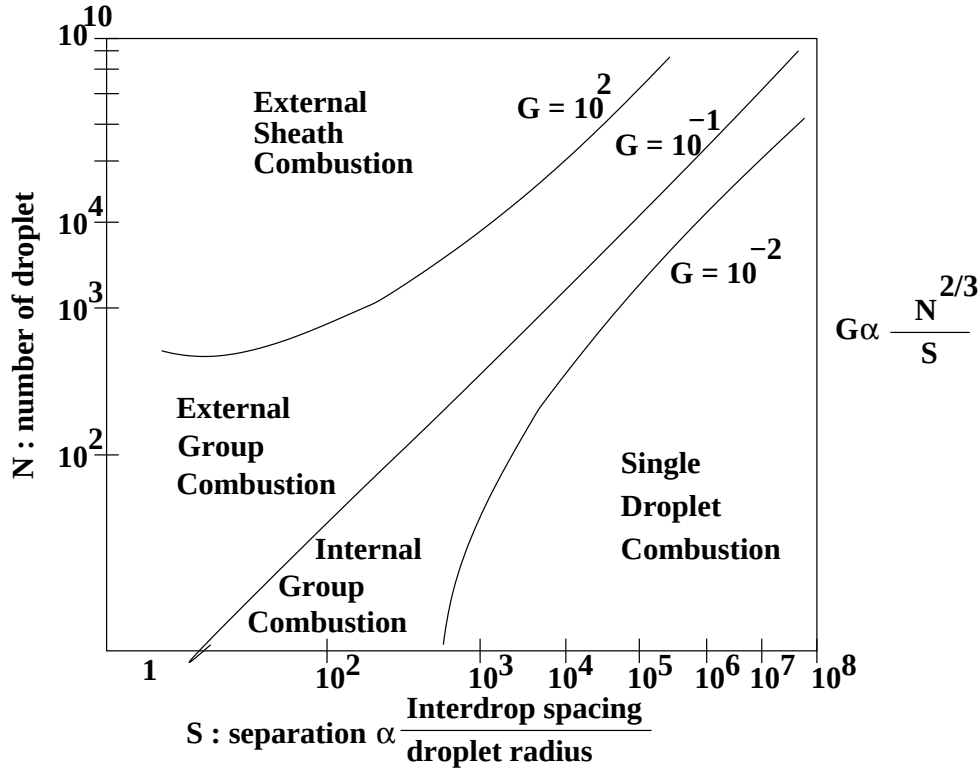


FIG. 4.1 – Diagramme de combustion de groupe [13, 35].

Deux travaux ont été pionniers dans la classification de la morphologie des flammes sprays. Un premier diagramme (fig. 4.1), développé par Chiu *et al* ([73, 16, 14, 15]) portait sur la détermination de la structure des flammes se propageant dans un nuage de gouttes plongé dans de l'oxydant préchauffé. Les régimes de combustion ont été classifiés selon le nombre de groupe G . Ce nombre sans dimension représente le rapport entre la vitesse caractéristique d'évaporation et la vitesse de diffusion moléculaire. Candel *et al* [9] ont montré que dans la plupart des cas, la relation suivante : $G \approx 5N^{2/3}/S$, existe entre le nombre de groupe G et le nombre de gouttes total dans le nuage N et le paramètre de séparation S . Ce nombre $S = \delta_s/\delta_{rf}$ est le rapport entre δ_s , l'espace inter-gouttes moyen, et δ_{rf} , un rayon caractéristique de la flamme de diffusion [34]. L'espace inter-gouttes moyen, $\delta_s = d^{-1/3}$, est déterminé directement à partir de la densité d de gouttes. La longueur δ_{rf} correspond au rayon d'une flamme de diffusion enveloppant une seule goutte en évaporation dans de l'oxydant au repos et ayant les propriétés moyenne du

spray. Ainsi, quand le nombre de séparation S décroît, il existe un point où la topologie de la flamme passe de la combustion de gouttes individuelles à la combustion de groupe. Ainsi, pour une valeur donnée de S , et pour un nombre N de gouttes par nuage, deux modes principaux (fig. 4.2) pour la combustion des sprays peuvent être identifiés en fonction du nombre de groupe G . Dans le cas où $G \gg 1$, les gouttes sont trop proches les unes des autres pour permettre la diffusion de la chaleur à l'intérieur du nuage. Seule une couche externe de gouttes est évaporée et la flamme résultante reste à une certaine distance de la limite du spray. Si $G \ll 1$, les gouttes sont assez éparpillées pour que les gaz chauds parviennent à atteindre le noyau du spray. Les processus d'évaporation et de combustion prennent alors place autour de chaque goutte. Ces conditions délimitent la frontière entre "régime de combustion externe" prévu pour $G \gg 1$, et qui est complémentaire du "régime de combustion interne" observé pour $G \ll 1$ (fig. 4.2). Une transition douce entre ces régimes limites a été prévue par Chiu *et al* [15], amenant à des sous-modes intermédiaires dépendants de l'amplitude de G . Quand G est légèrement supérieur à 1, la flamme reste autour du groupe de gouttes avec une augmentation de la température de la phase liquide affectant le noyau du nuage. Pour G légèrement inférieur à 1, un premier anneau de gouttes brûlant individuellement est centré sur le nuage de gouttes qui est lui-même entouré par une flamme de diffusion.

Par la suite, Chang puis Borghi *et al* ([12, 3, 2, 4]) ont ajouté à cette analyse des paramètres de contrôle de la flamme elle-même, à savoir le temps caractéristique de la flamme τ_f et son épaisseur δ_f . Le temps d'évaporation moyen τ_v est également introduit. Lorsque $\tau_v \ll \tau_f$, le mélange est localement prémélangé et une flamme se propage (fig. 4.4-a). Ce régime est vérifié pour toutes les valeurs de l'espace inter-gouttes moyen δ_s et de l'épaisseur de flamme δ_f . En pratique, le rapport d'équivalence du mélange n'est pas complètement uniforme et un front partiellement prémélangé variant faiblement se propage. Si le temps d'évaporation est assez grand, pour $\delta_f > \delta_s$, les gouttes pénètrent les couches diffusives réactives puisque la flamme est plus large que l'espace inter-goutte moyen. Cette situation devrait rapidement favoriser l'épaississement de la flamme (fig. 4.4-b). Hormis ces cas extrêmes, le nombre de séparation (S) doit être introduit. Après la propagation d'un front partiellement prémélangé primaire, il peut encore rester quelques gouttes en évaporation, entraînant une zone de réaction secondaire (ou back flame= "flamme avale") (fig. 4.4-c). La topologie de cette zone de combustion secon-

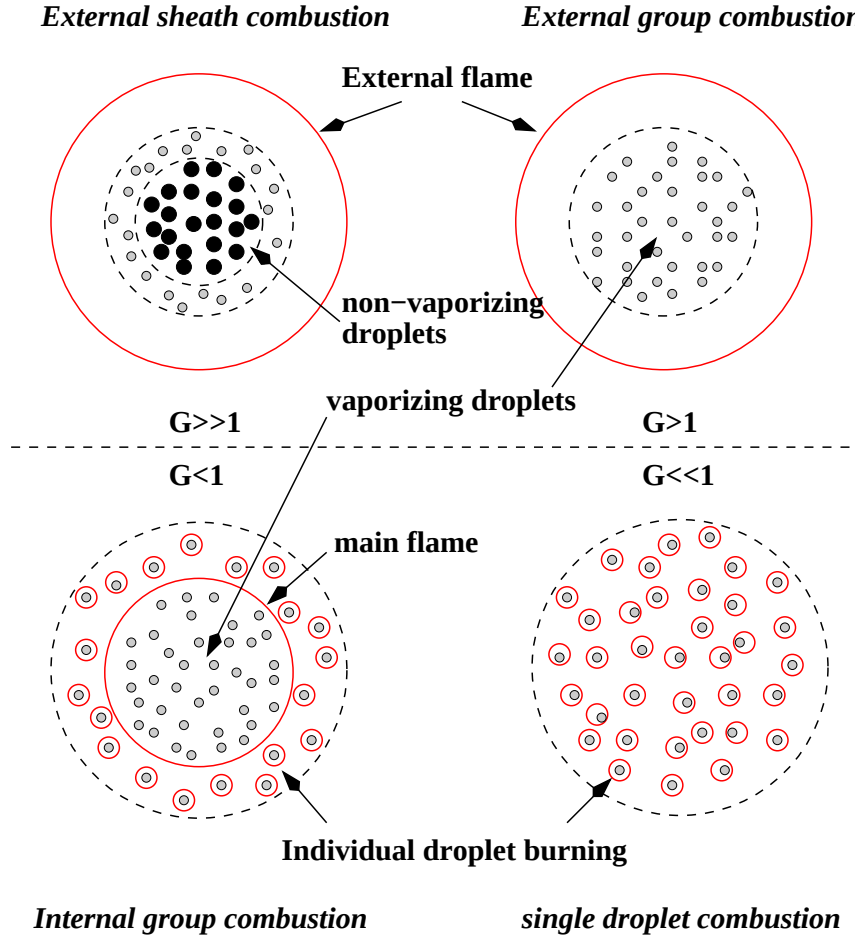


FIG. 4.2 – Modes de combustion d'un nuage de gouttes[15, 35].

daire dépend de l'amplitude de S . Pour de petites valeurs de $S = \delta_s/\delta_{r_f}$, les gouttes brûlent individuellement ou bien elles sont séparées en petits groupes enveloppés par une flamme, ce qui est appelé "régime de combustion de groupe". En complément, Borghi *et al* ont distingué le régime de percolation et le régime de poches (fig. 4.5), et qui sont représentés figure 4.3.

Chiu *et al* and Borghi *et al* ont défini les structures de flammes dans le cas d'un spray initialement au repos sans considérer le rapport massique combustible liquide/oxydant. Cependant, dans un système réel de combustion de spray, la richesse est connue pour modifier la stabilité de la flamme, avec l'ensemble des propriétés de la chambre de combustion. C'est un paramètre clef à rajouter pour la description des flammes. En effet, la topologie des zones de réaction

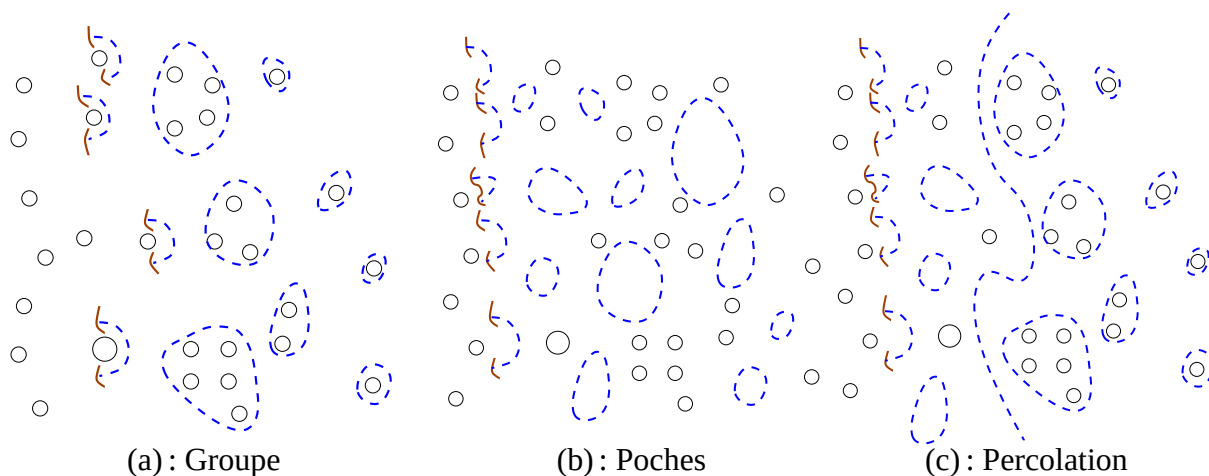


FIG. 4.3 – Structures de flammes se développant dans un spray de gouttes au repos ([2]). Lignes : fronts prémélangés, tirés : flammes de diffusion.

primaire et secondaire peut varier avec l'ajout de ce paramètre. Par exemple, des extinctions locales peuvent être observées à cause de rapports d'équivalence locaux en dehors des limites de flammabilité. De plus, les gouttes et la composition du mélange sont également sensibles à la convection qui joue un rôle crucial dans la combustion de spray. Des images de flammes peuvent alors être difficilement prévues d'après une analyse d'un écoulement au repos.

Pour améliorer la caractérisation d'une flamme spray, des DNS d'un problème simplifié de jet diphasique brûlant dans un coflow d'air sont réalisées, avec comme paramètres variables le rapport d'équivalence, le temps d'évaporation, et l'espace moyen inter-gouttes. Dans les sections suivantes, la configuration de l'écoulement est présentée ainsi que les paramètres de contrôle. Diverses structures de flammes sont ensuite présentées d'après les bases de données DNS et un diagramme de la combustion de spray est proposé.

4.2 Configurations de calculs

Un jet avec un coflow préchauffé et fluctuant est choisi comme configuration de calcul. Plusieurs raisons physiques et pratiques expliquent ce choix. Premièrement, les écoulements réactifs dans les systèmes industriels résultent souvent de l'injection de combustible gazeux ou liquide dans un bluff-body à géométrie confinée (planche 4.6-(a)). La combustion dans de telles

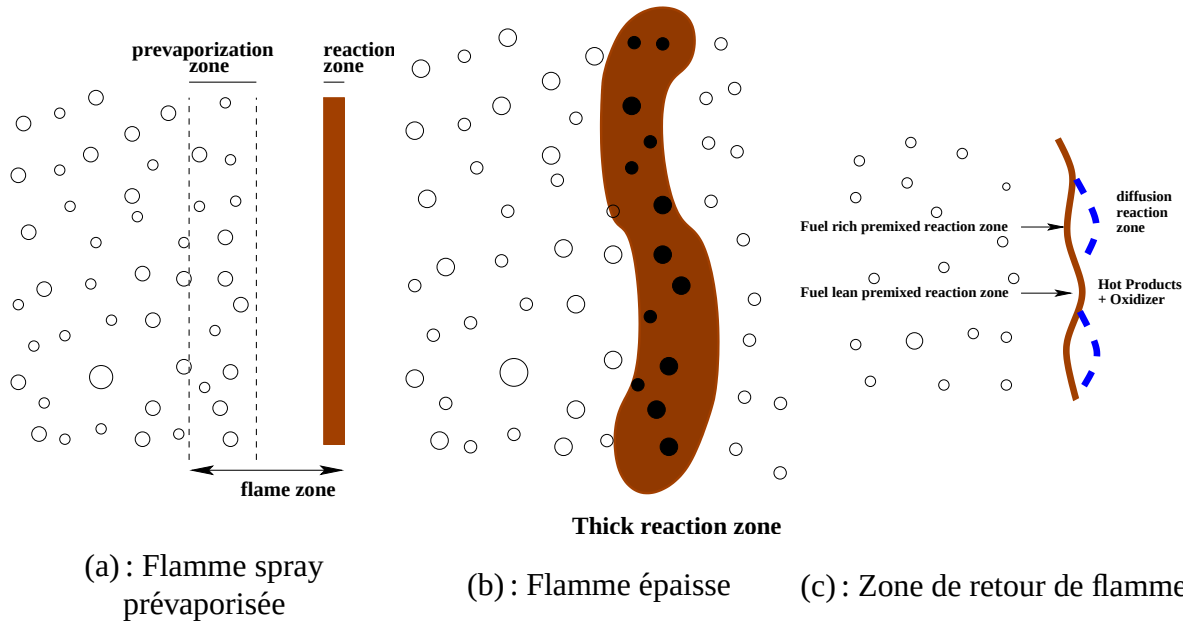


FIG. 4.4 – Structures de flamme laminaires, cas limites ([2]).

chambres peut être stabilisée selon deux processus : soit la flamme est accrochée aux lèvres de l’injecteur, soit elle est stabilisée grâce à la recirculation des gaz chauds situés derrière le paroi du bluff-body (planche 4.6-(a)). Cependant, quand un spray de fuel est injecté, cette dernière configuration est la plus probable à cause du délai de vaporisation des gouttes. La DNS d’écoulements réactifs compressibles est coûteuse en temps et, pour effectuer assez de simulations dans un délai raisonnable, la géométrie du bluff-body a été simplifiée sous la forme d’un jet avec des coflows préchauffés (planche 4.6-(b)). De plus, pour accélérer la destabilisation du jet, le profil de vitesse du coflow est artificiellement perturbé. Cela nous permet d’éviter une grande (et donc coûteuse) ouverture de jet. Cette étude, qui est une des premières DNS d’écoulements réactifs à deux phases pleinement compressibles, est focalisée sur les structures de flammes issues de l’évaporation du spray plutôt que sur une configuration de jet réaliste.

De nombreuses interactions entre les gouttes, les tourbillons et les flammes ont lieu durant les simulations. Pour analyser de manière intelligible et comparer les phénomènes physiques impliqués, le nombre de paramètres variables est minimisé. Cette partie étant principalement dédiée aux interactions sprays/tourbillons, les constantes de la réaction chimique, les propriétés de l’écoulement gazeux et les paramètres du jet (la largeur du jet δ_j et la vitesse maxi-

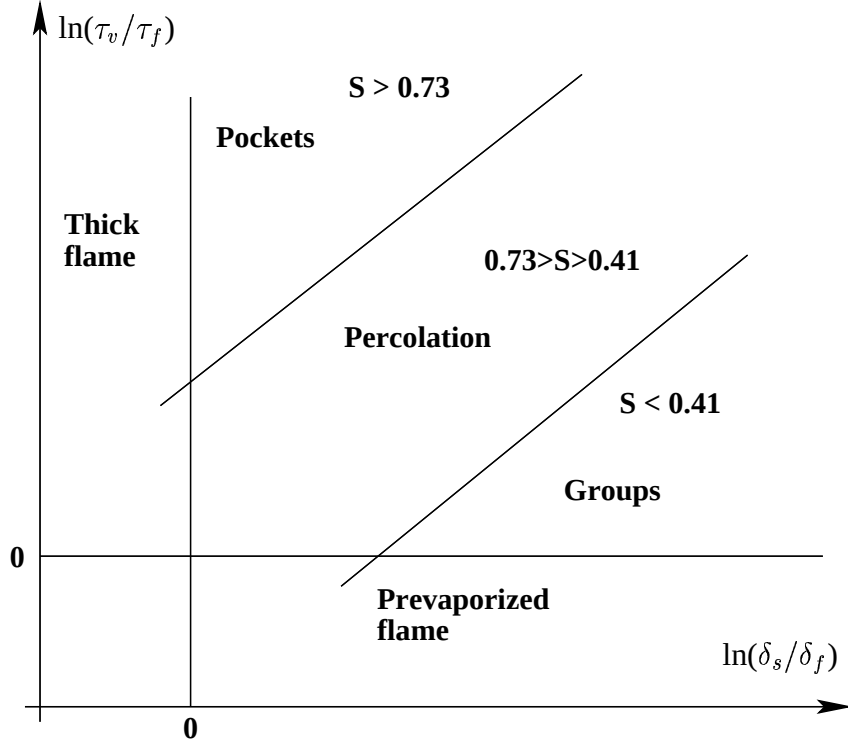


FIG. 4.5 – Diagramme de Borghi pour une flamme laminaire se propageant dans un spray de gouttes polydispersé homogène ([2]).

mum u_J) sont les mêmes pour toutes les simulations. La température et les profils de vitesse sont également imposés. Seules les propriétés du spray injecté (délais d'évaporation, rapport d'équivalence, densité des gouttes) sont des paramètres variables.

4.2.1 Vitesse d'injection et profils de température

La largeur du domaine ($L_x = 14.22\delta_J = 102.6\delta_f$) et la hauteur ($L_y = L_x/2$) ont été discrétisées avec un maillage Cartésien régulier ($N_x = 513$ et $N_y = 257$).

En notant respectivement x et y les coordonnées longitudinale et transversale, le profil de vitesse d'entrée a été généré d'après une fonction analytique. La forme initiale de cette fonction est donnée par $p(y) = -\exp\left(-\left(\frac{y-\delta_{1/2j}}{\Delta_J}\right)^2\right) + \exp\left(-\left(\frac{y+\delta_{1/2j}}{\Delta_J}\right)^2\right)$ où $\delta_{1/2j}$ est la moitié de la largeur du jet δ_J . Δ_J est un paramètre permettant de contrôler le gradient maximum du profil. La fonction $p(y)$ a été normalisée entre 0 et 1 puis multipliée par les vitesses maximales imposées.

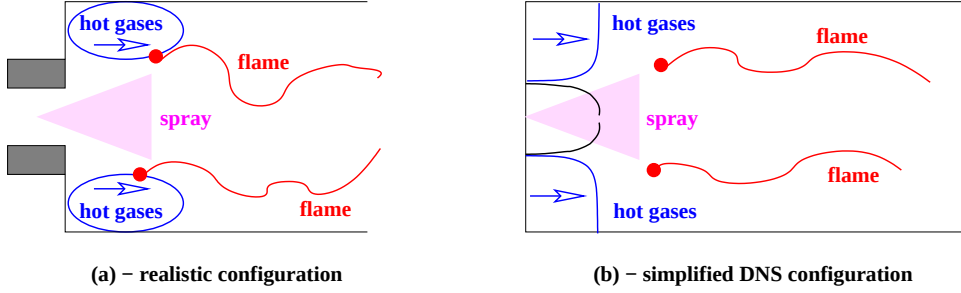


FIG. 4.6 – Schémas de la configuration de calcul. (a)-stabilisation d'une flamme générée par un bluff-body, (b)-géométrie d'une DNS simplifiée.

Le profil de vitesse du jet principal ($-\delta_{1/2j} \leq y \leq \delta_{1/2j}$) est constant durant les simulations. Son expression est donnée par :

$$U(x=0, y) = P_1(y) * u_J, \quad P_1(y) = \frac{1 + p(y) + \exp\left(-4 \frac{\delta_{1/2j}^2}{\Delta_J^2}\right)}{1 + \exp\left(-4 \frac{\delta_{1/2j}^2}{\Delta_J^2}\right) - 2 \exp\left(-\frac{\delta_{1/2j}^2}{\Delta_J^2}\right)}. \quad (4.1)$$

Les deux coflows du haut ($y > \delta_{1/2j}$) et du bas ($y < \delta_{1/2j}$) suivent une loi sinusoïdale dépendant du temps mais avec des phases opposées :

$$U(x=0, y, t) = \begin{cases} P_2(y) * u_J * \left(1 + A \sin 2\pi t \frac{S_t u_J}{2\delta_{1/2j}}\right) & \text{si } y > \delta_{1/2j} \\ P_2(y) * u_J * \left(1 - A \sin 2\pi t \frac{S_t u_J}{2\delta_{1/2j}}\right) & \text{si } y < \delta_{1/2j} \end{cases}, \quad (4.2)$$

avec

$$P_2(y) = 1 + \frac{p(y)}{1 + \exp\left(-4 \frac{\delta_{1/2j}^2}{\Delta_J^2}\right)}. \quad (4.3)$$

La destabilisation du jet est basée sur le nombre de Strouhal S_t et A est l'amplitude de fluctuation du coflow. Tous les paramètres sont donnés dans le tableau 4.1. Le profil de température est indépendant du temps et il est défini par la relation suivante :

$$T(x=0, y) = \begin{cases} T_0 & \text{si } -\delta_{1/2j} \leq y \leq \delta_{1/2j} \\ T_0 + P_2(y) * T_c & \text{sinon} \end{cases}. \quad (4.4)$$

Seul l'écoulement du coflow est préchauffé jusqu'à T_c défini dans le tableau 4.1. Le jet principal ($-\delta_{1/2j} \leq y \leq \delta_{1/2j}$) reste à la température des gaz frais T_0 . Les profils de température

(a)	L_x	L_y	N_x	N_y	Re	S_c	P_r
flow	$14.22\delta_J$	$7.11\delta_J$	513	257	3000	0.7	0.7
jet	δ_J	u_J	Δ_J	S_t	A	τ_{St}	T_c
jet	$0.88\delta_0$	$0.3u_0$	$0.15\delta_0$	0.6	$0.33u_J$	$4.89\tau_0$	$3.125T_0$
flame	δ_f	u_f	α	T_s			
flame	$0.12\delta_0$	$0.014u_0$	0.8	$5T_0$			

(b)	δ_0	δ_J	δ_f	(c)	u_0	u_J	u_f	(d)	τ_0	τ_J	τ_f
δ_0	1	1.13	8.17	u_0	1	3.33	71.4	τ_0	1	0.34	0.11
δ_J	0.88	1	7.21	u_J	0.3	1	21.4	τ_J	2.94	1	0.34
δ_f	0.12	0.14	1	u_f	0.014	0.047	1	τ_f	8.74	2.97	1

TAB. 4.1 – Résumé des paramètres utilisés dans toutes les simulations.

et de vitesse sont représentés figure 4.7. La vitesse de battement du coflow y est également représentée.

4.2.2 Propriétés du spray variant

Le spray est injecté avec l'écoulement principal ($-\delta_{1/2j} \leq y \leq \delta_{1/2j}$). Il est initialement monodispersé bien que les effets de l'évaporation et du mélange combinés dispersent rapidement les diverses classes de gouttes. Ainsi, le spray dans le domaine de calcul devient polydispersé.

Les caractéristiques des diverses simulations qui ont été réalisées sont résumées dans le tableau 4.2. Si les débits massiques de combustible liquide et d'oxydant gazeux sont notés $\dot{m}_F$ et $\dot{m}_O$ respectivement, il est possible de quantifier le rapport d'équivalence de l'injecteur Φ_{L0}^I et de l'ensemble du brûleur Φ_{L0}^B grâce aux relations suivantes :

$$\Phi_{L0}^I = \Phi_s * \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O^I} \text{ and } \Phi_{L0}^B = \Phi_s * \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O^B} , \quad (4.5)$$

où $\dot{m}_O^I$ et $\dot{m}_O^B$ sont les débits d'oxydant dans l'écoulement du jet principal ($-\delta_{1/2j} \leq y \leq \delta_{1/2j}$) et dans le plan entier d'admission ($-Y_J/2 \leq y \leq Y_J/2$) respectivement. Puisque l'écoulement d'oxydant est le même dans l'ensemble des simulations, Φ_{L0}^I et Φ_{L0}^B sont linéairement liés à travers la relation $\Phi_{L0}^I/\Phi_{L0}^B = \dot{m}_O^B/\dot{m}_O^I = 9.65$.

Φ_{L0}^I est l'un des trois principaux paramètres variables de nos simulations. Il nous permet d'étudier différents régimes des flammes sprays allant de la limite d'extinction pauvre à la com-

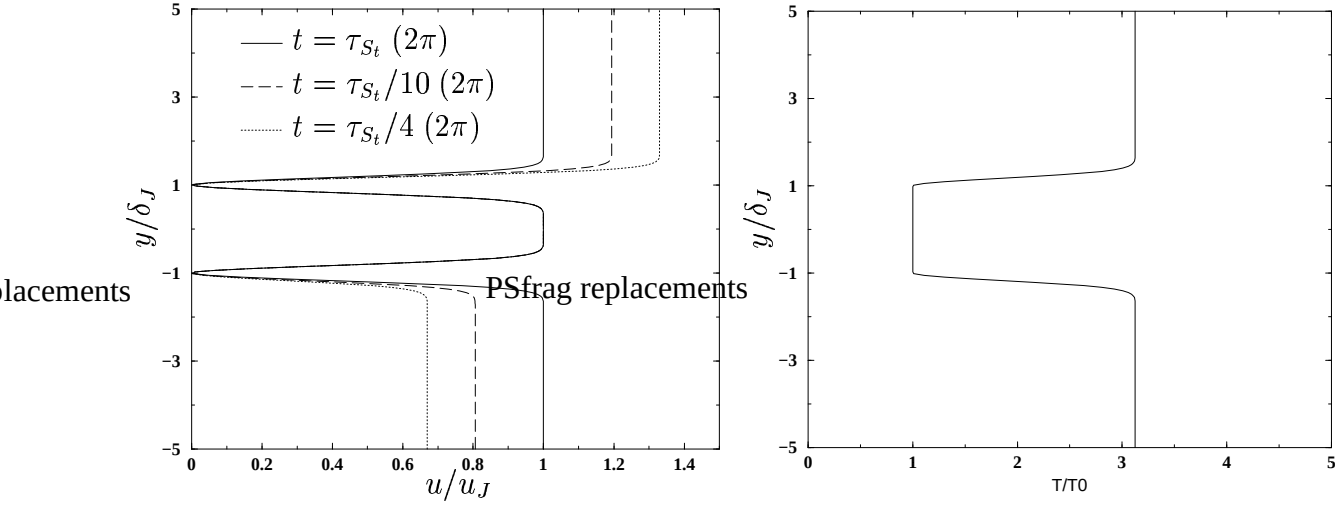


FIG. 4.7 – Profils d’entrée ($x = 0$) de la configuration. A gauche : Profil de vitesse en fonction du temps t . A droite : profil de température constant.

bustion riche. Pour un rapport d’équivalence donné de l’injecteur, le spray peut être composé de nombreuses petites gouttes ou de quelques grosses gouttes. Par conséquent, pour décrire la topologie du combustible injecté, un paramètre de densité d^I est introduit. Il fournit le nombre de gouttes par unité de volume dans l’injecteur ($-\delta_J/2 \leq y \leq \delta_J/2$). Celui-ci correspond à une répartition de gouttes variant entre 1 goutte toutes les 3 mailles quand $d^I = 25$ jusqu’à 2 gouttes par maille quand $d^I = 248$. Le diamètre initial des gouttes peut être directement déduit des deux paramètres précédents Φ_{L0}^I et d^I :

$$s_0 = \left(6\sqrt{\pi} \mathcal{V} \frac{\rho \Phi_{L0}^I}{\rho_d \Phi_s} \right)^{2/3}. \quad (4.6)$$

Un dernier paramètre de contrôle concerne le taux de vaporisation du spray. Seule la loi de saturation (SFD) a été utilisée.

Les noms et les propriétés de toutes les simulations effectuées dans cette partie sont obtenus par une combinaison des données du tableau 4.2. Par exemple, la simulation **FST-D041-ER185** correspond à une simulation avec battement (**F** pour ‘flapping’), avec un contrôle de la vaporisation par la loi de la saturation (**ST**) et une densité initiale du spray n/δ_f^3 égale à 41. Pour finir, le rapport d’équivalence de l’injecteur Φ_{L0}^I est égal à 1.85.

L’objectif principal de cette étude est de comparer diverses simulations réactives avec un

Evap. mode		Flow		Dens. $d^I, n/\delta_f^3$		Φ_{L0}^I	
ST	Saturation	L	lam.	D248	248	ER087	0.87
		F	flap.	D041	41	ER100	1.00
				D025	25	ER113	1.13
						ER148	1.48
						ER185	1.85
						ER265	2.65

TAB. 4.2 – Les propriétés sont codées dans les noms des simulations.

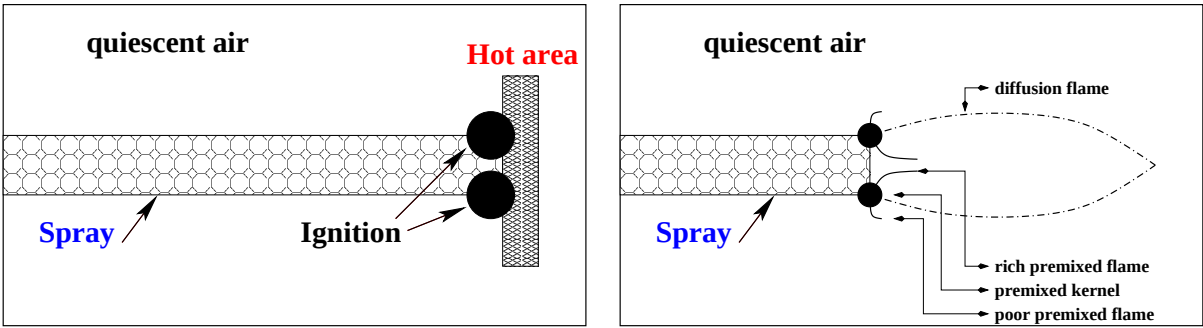
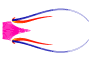
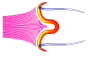


FIG. 4.8 – Schéma d’une configuration laminaire. A gauche : allumage par un dépôt d’énergie, à droite : propagation de flamme (cas riche).

coflow fluctuant. Cependant, quatre cas laminaires ont été réalisés pour extraire les structures basiques des flammes se propageant autour d’un spray de gouttes. Les configurations reconnues comme laminaires (**L** dans le tableau 4.2) ont les mêmes propriétés pour le spray (rapport d’équivalence, temps d’évaporation et densité de gouttes) que dans le cas fluctuant. Par contre, l’écoulement gazeux est au repos (vitesse initiale nulle, température uniforme T_0) et une analyse rapide de la flamme se propageant dans les poches de gouttes est effectuée. La flamme a été allumée par une mise à l’équilibre chimique dans une petite région du domaine (figure 4.8). Les analyses sont effectuées loin du point d’allumage lorsque les propriétés de la flamme sont stationnaires.

4.3 Flammes sprays laminaires

Quatre simulations ont été réalisées pour extraire la structure de flammes laminaires se propageant autour des poches de gouttes dans une atmosphère au repos. Le paramètre variable est

	Code	s_0/δ_f^2	$\tau_v/\tau_f \ll 1$	Φ_{L0}^I
	LST-D248-ER265	$1.24E - 4$	$5.4E - 2$	2.65
	LST-D248-ER185	$9.78E - 5$	$4.3E - 2$	1.85
	LST-D248-ER148	$8.43E - 5$	$3.7E - 2$	1.48
	LST-D248-ER113	$7.02E - 5$	$3.1E - 2$	1.13

TAB. 4.3 – Résumé des configurations laminaires.

le rapport d'équivalence initial du spray qui varie de $\Phi_{L0}^I = 1.13$ à $\Phi_{L0}^I = 2.65$. Les paramètres des simulations laminaires sont résumés dans le tableau 4.3. Pour l'analyse de la structure de flamme, le temps d'évaporation est petit comparativement au temps caractéristique de la flamme ($\tau_v/\tau_f \ll 1$). Ainsi, la flamme se propage sans aucune difficulté dans le nuage de gouttes et les propriétés observées sont stationnaires dans le référentiel qui est lié au front de flamme. La planche P4.1. montre les structures de flamme observées dans les quatre simulations. Il est à noter que des simulations complètes de tout le domaine ont été effectuées démontrant que la symétrie de la géométrie est numériquement conservée.

Un régime partiellement prémélangé est observé dans les quatre simulations. Hormis pour le cas pauvre (**LST-D248-ER113**, planche P4.1.a), des extrémités de flammes prémélangées se propagent le long du niveau iso-stoechiométrique de la fraction de mélange $Z_s = 1/(1 + \Phi_s) = 0.0625$. Une légère zone préchauffée en amont du front de flamme vaporise les gouttes conduisant à un champ dont la fraction de mélange est adéquate. De ces extrémités de flammes émerge une structure de flamme triple classique avec une courte flamme prémélangée pauvre du côté de l'oxydant, une flamme prémélangée riche du côté des gouttes et une longue flamme de diffusion, coïncidant avec le niveau Z_s . Les structures de flammes triples sont maintenant des résultats classiques dans la combustion partiellement prémélangée ([66, 18, 5]) et il est connu que ces flammes s'adaptent à leur environnement pour une propagation optimale.

La propagation de ces fronts de flamme dévie les lignes de courant et génère les tour-

billons vus planche P4.3.a pour les quatre simulations. Par conséquent, les gouttes suivent deux comportements distincts : elles sont légèrement dispersées sur les bords du train par les tourbillons externes et elles sont pincées le long de l'axe central ($y = 0$) par les tourbillons contra-rotatifs internes. La déviation des gouttes dans le cas **LST-D248-ER113** explique la combustion prémélangée pauvre qui peut être observée (planche P4.1.a). En effet, la dispersion des gouttes conduit à un plus grand volume de vaporisation pour la phase liquide. Ainsi, dans une poche de gouttes qui est légèrement riche initialement ($\Phi_{L0}^I = 1.13$), la propagation de la flamme prémélangée pauvre est observée. Le régime prémélangé est confirmé par le profil du taux de prémélange Ξ_p présenté planche P4.1. ainsi que par les structures de flammes. Ce paramètre normalisé est défini par la quantité de dégagement de chaleur provenant de la combustion en régime prémélangé, intégré sur la direction transversale tel que $\Xi_p = \int_y \xi_p \dot{\omega}_r dy / \int_y \dot{\omega}_r dy$, pour une position longitudinale x donnée. S'il y a une réaction le long de la direction transversale considérée, Ξ_p donne la quantité de dégagement de chaleur provenant de la combustion en régime prémélangé et $\dot{\omega}_r$ correspond au taux de dégagement de chaleur de la réaction. ξ_p est un paramètre introduit par Favier et Vervisch [25] qui permet de différencier les régimes de combustion prémélangé et non-prémélangé, défini par la relation :

$$\xi_p = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\nabla Y_F}{|\nabla Y_F|} \cdot \frac{\nabla Y_O}{|\nabla Y_O|} \right) \quad (4.7)$$

$\xi_p = 1$ si la flamme brûle en prémélange et $\xi_p = 0$ si la flamme brûle en non-prémélangé. Sur la planche P4.1., Ξ_p est représenté en fonction de toutes les positions x pour les quatre flammes laminaires. Mise à part la flamme en régime prémélangé pauvre observée planche P4.1.a, les trois autres flammes se divisent en régime de diffusion et de prémélange (planche P4.1.-(b,c,d)). Plus le rapport d'équivalence initial Φ_{L0}^I est grand, plus le régime de diffusion est important.

Dès que la richesse Φ_{L0}^I augmente, des structures de flammes triples apparaissent et les gouttes s'accumulent au centre du domaine ($y = 0$) du fait des tourbillons centraux (planche P4.3.a). Par conséquent, les gouttes pénètrent entre les deux points triples. La fraction de mélange est alors maximale et si le front prémélangé riche continu est maintenu dans le cas **LST-D248-ER148** (planche P4.1.b), ce n'est pas le cas pour les deux cas riches **LST-D248-ER185** (planche P4.1.c) et **LST-D248-ER265** (planche P4.1.d), où il y a trop de combustible pour qu'une flamme se développe.

Une autre manière d'observer la structure d'une flamme autour d'une poche de gouttes est de représenter les réactifs Y_F et Y_O et la température dans l'espace de la fraction de mélange (planche P4.2.). Comparativement à la combustion gazeuse classique, la structure de flamme révèle quelques anomalies. Les résultats classiques de la solution de Burke et Schumann (B&S) [7] pour une flamme de diffusion sont représentés planche P4.2. le long des droites de mélange. A cause de la définition de la fraction de mélange pour un écoulement à deux phases, la zone de réaction dans le diagramme n'est pas située entre l'ensemble des droites de mélange et les droites d'équilibre de B&S, comme cela a pu être observé pour la combustion gazeuse [53]. En effet, la valeur maximum de Z a été obtenue en considérant la fraction massique de combustible dans le noyau liquide de gouttelettes ($Y_F = 1$) mais la fraction de mélange $Z = 1$ n'est jamais atteinte par le mélange gazeux. Pour un spray en évaporation, la valeur maximale de la fraction de mélange gazeuse est égale au niveau de saturation du spray. Cependant, il n'a pas été choisi comme niveau de référence car il n'est pas constant et il dépend des propriétés locales de l'écoulement : température, pression et fraction massique de combustible gazeux. Les figures (a',b',c') de la planche P4.2. ont été réalisées pour la configuration la plus riche **LST-D248-ER265**. Dans la zone pauvre ($Z < Z_s$), la structure de flamme évolue entre les droites de mélange et d'équilibre, comme pour la flamme gazeuse. Mais dans la zone riche, la structure de flamme suit la droite d'équilibre près du niveau stoechiométrique avant de rattraper la droite de mélange jusqu'à la valeur maximale de la fraction de mélange près de 0.2. Un scénario des nouveaux domaines réactifs pour la combustion à deux phases est représenté sur les figures (a,b,c) de la planche P4.2.. Ces domaines sont maintenant délimités par une droite traversant le domaine de la flamme en partant de la droite d'équilibre jusqu'à la droite de mélange. La pente de la droite et la valeur maximale de Z atteinte dans le diagramme dépendent du rapport d'équivalence initial Φ_{L0}^I de la poche de gouttes et des propriétés de saturation du liquide.

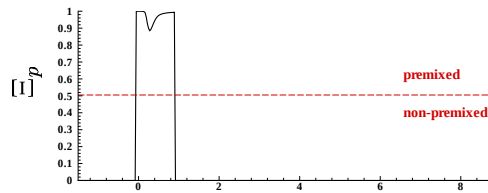
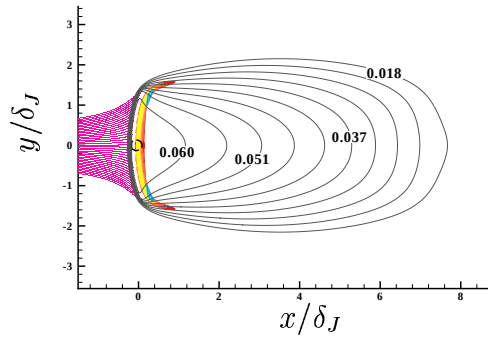
Le dégagement de chaleur est représenté planche P4.3.b en fonction de la fraction de mélange. Les régimes non-prémélangé et prémélangé ont été isolés. Nous pouvons observer une structure de flamme où le régime de diffusion est centré autour de la fraction de mélange stoechiométrique avec un niveau global du dégagement de chaleur environ égal à 20% de celui d'une flamme prémélangée gazeuse stoechiométrique correspondante (valeur de référence). Le régime prémélangé atteint approximativement 90% du dégagement de chaleur de référence. De

plus, il est important de noter que même si le rapport d'équivalence initial du train de gouttes est riche ($\Phi_{L0}^I = 2.65$), la flamme est capable de maintenir un régime prémélangé riche avec un dégagement de chaleur équivalent au régime non-prémélangé. Ce dégagement de chaleur a été représenté en fonction de la dissipation locale de la fraction de mélange définie par la relation $\chi = 2D^* |\nabla Z|^2$ qui est directement liée au gradient local de la fraction de mélange. Dans les quatre configurations laminaires, la flamme se propage de façon stationnaire le long des trains de gouttes et la dissipation de la fraction de mélange n'atteint jamais un niveau proche de la limite d'extinction qui est approximativement dix fois plus grand que les niveaux observés dans le domaine (planche P4.4.). Les niveaux de dissipation de la fraction de mélange par rapport à la position de la flamme varient fortement en fonction de rapport d'équivalence initial Φ_{L0}^I des nuages de gouttes. Pour le cas le plus pauvre : **LST-D248-ER113**, χ reste très faible dans tout le domaine. Le front prémélangé principal brûle pour une valeur nulle du taux de dissipation.

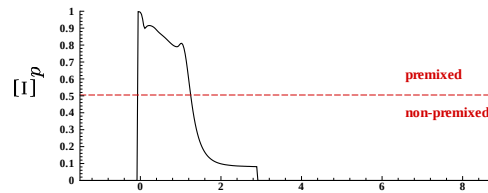
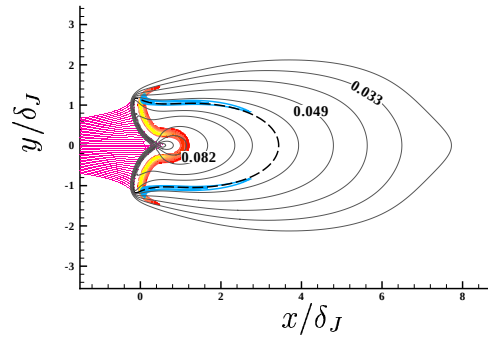
Quand la richesse du train augmente un régime non-prémélangé apparaît. Dans ce cas, le niveau maximum du dégagement de chaleur correspond à la combustion stoechiométrique et il suit une forme parabolique le long de la coordonnée χ . Ces résultats sont similaires aux théories asymptotiques développées pour les flammes non-prémélangées gazeuses [53]. Le niveau de dissipation général augmente également à cause du pincement du spray au centre du domaine conduisant à quelques niveaux localisés élevés de la fraction de mélange et donc à des gradients élevés. Le dégagement de chaleur du régime prémélangé qui est concentré dans la zone de dissipation de fraction de mélange faible pour des rapports d'équivalence faibles (cas **LST-D248-ER113** et **LST-D248-ER148**) est décalé vers un niveau élevé de χ dès que la flamme prémélangée riche centrale n'est plus continue (cas **LST-D248-ER185** et **LST-D248-ER265**).

Conclusion

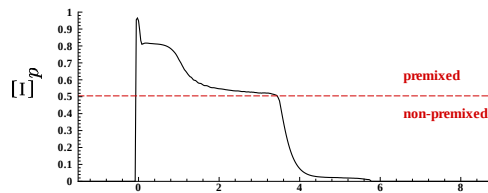
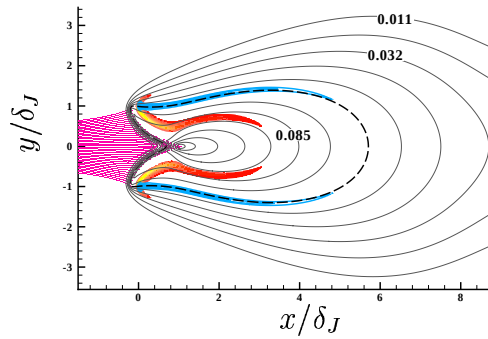
Une étude sur des flammes sprays laminaires a été effectuée. Nous avons pu constater l'apparition de flammes triples classiques identiques à celles observées dans la combustion d'un mélange purement gazeux, et nous avons pu voir que certains comportements de flammes gazeuses sont respectées. Enfin, une cartographie différente de ces flammes sprays en fonction de la fraction de la mélange a été mise en évidence.



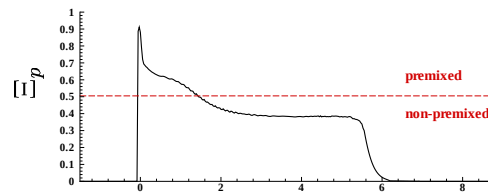
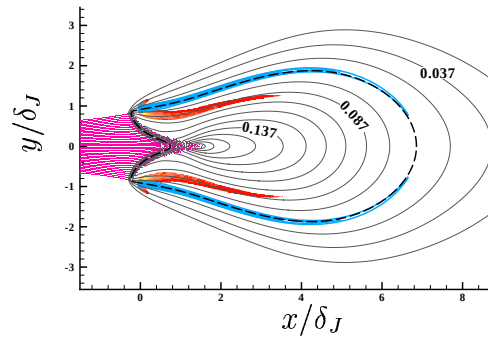
(a) : LST-D248-ER113



(b) : LST-D248-ER148

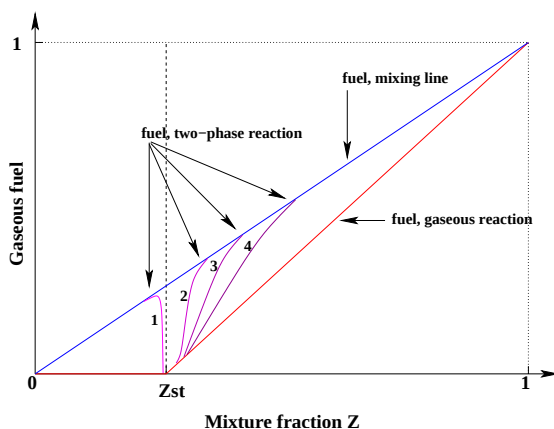


(c) : LST-D248-ER185

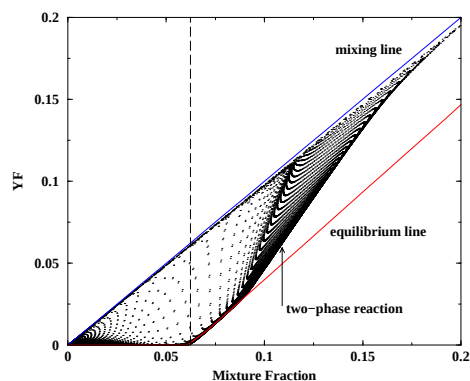


(d) : LST-D248-ER265

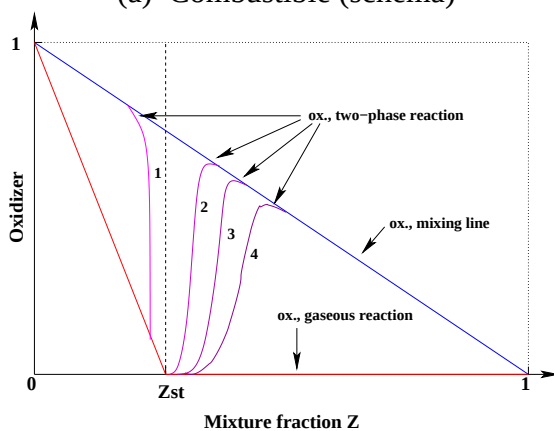
P4.1. - Propagation du front de flamme et taux de dégagement de chaleur prémélangé Ξ_p , cas laminaires. Points (fushia) : gouttes, en orange : flamme prémélangée, isolignes épaisses (bleues) : flamme de diffusion, isolignes fines (gris) : fraction de mélange Z , tirés : niveau de fraction de mélange stoechiométrique Z_s .



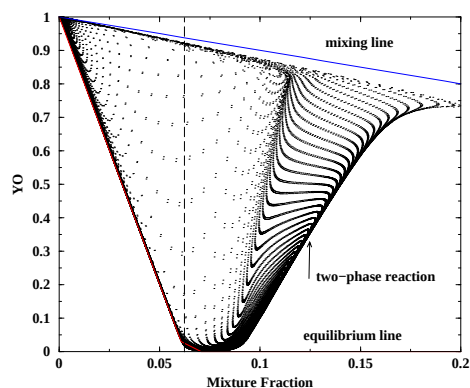
(a)-Combustible (schéma)



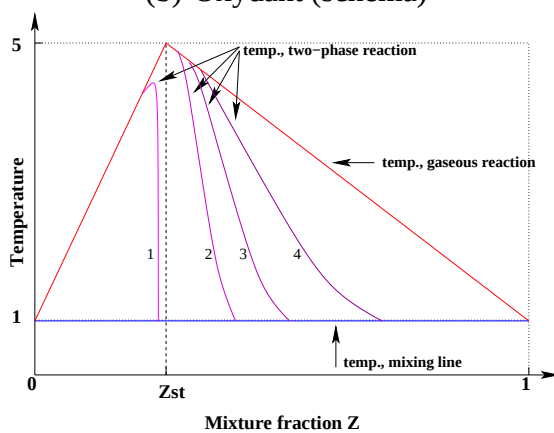
(a')-Combustible (LST-D248-ER265)



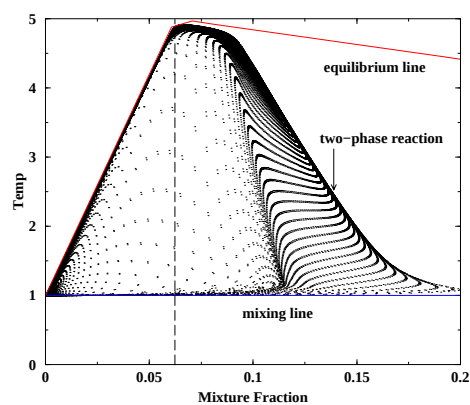
(b)-Oxydant (schéma)



(b')-Oxydant (LST-D248-ER265)

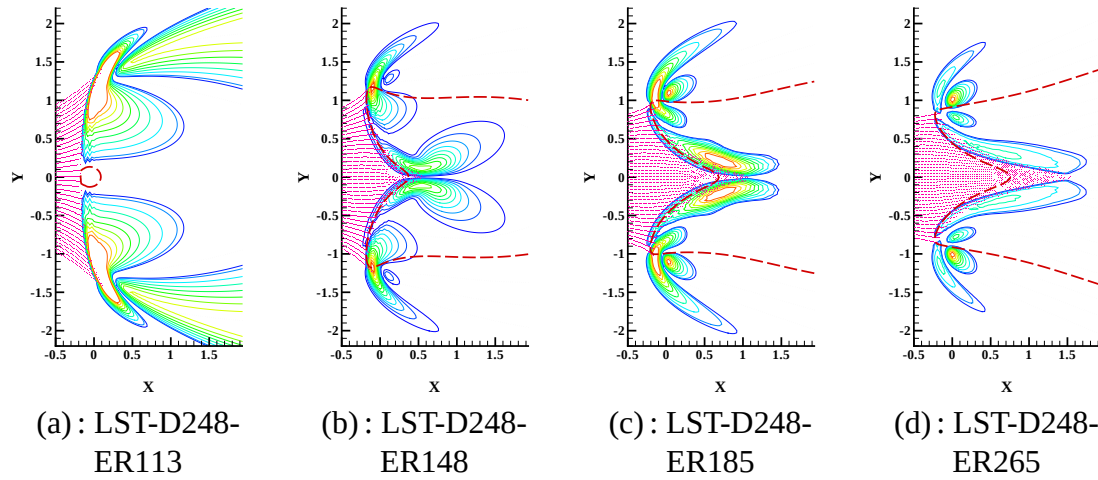


(c)-Température (schéma)

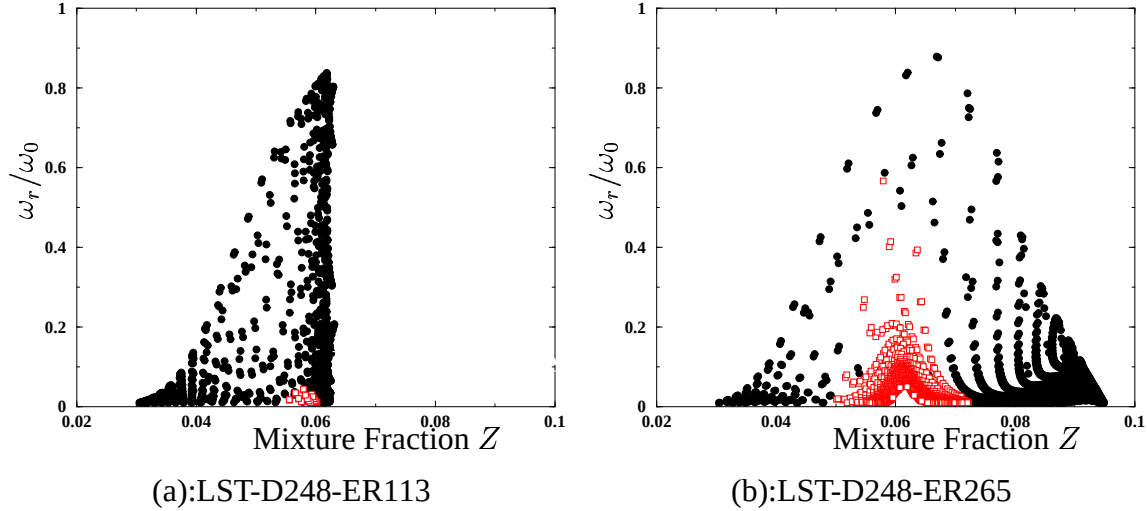


(c')-Température (LST-D248-ER265)

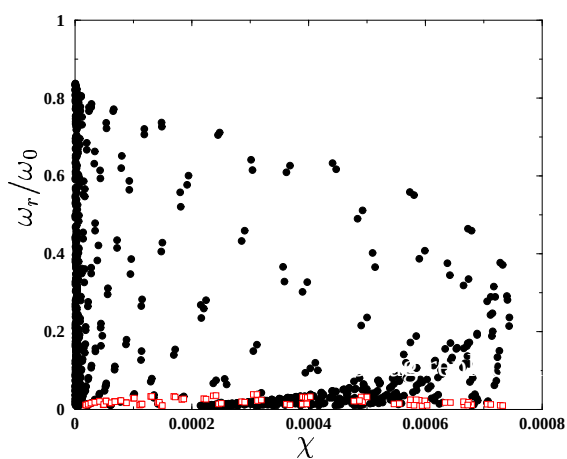
P4.2. - Structure de flamme dans l'espace de la fraction de mélange pour une flamme de diffusion.



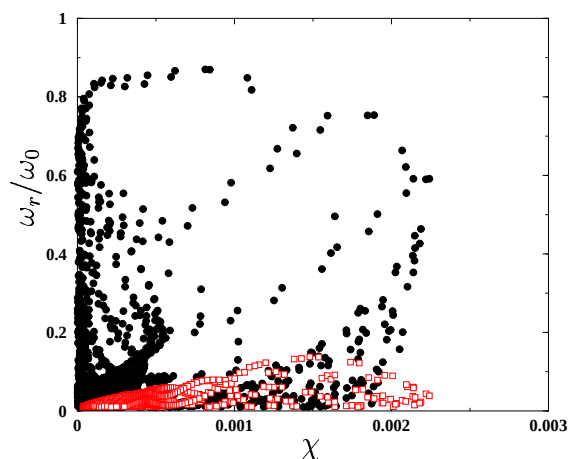
P4.3.a - Tourbillons générés par le front de flamme, cas laminaire. Lignes continues : niveaux de vorticit , pointill s : niveaux de fraction de m lange Z , tir s : niveau de fraction de m lange stoechiom trique Z_s .



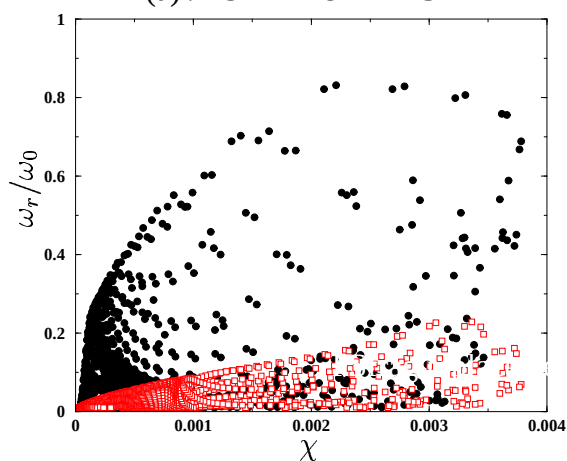
P4.3.b - D gagement de chaleur dans l'espace de la fraction de m lange. Cercles : r gime pr m lang , carr s : r gime de diffusion.



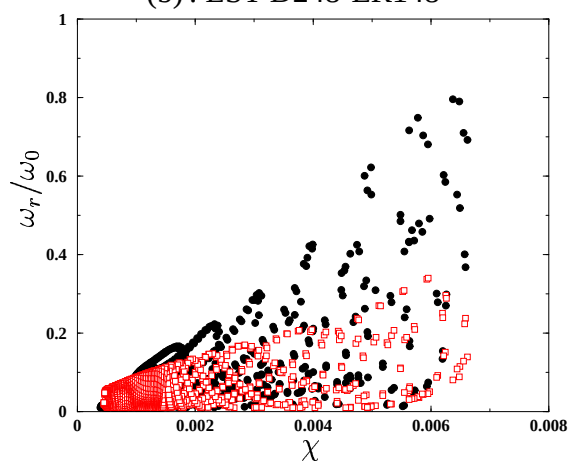
(a) : LST-D248-ER113



(b) : LST-D248-ER148



(c) : LST-D248-ER185



(d) : LST-D248-ER265

P4.4. - Dégagement de chaleur en fonction du taux de dissipation de la fraction de mélange χ pour l'ensemble du domaine. Cercles : régime prémélangé, carrés : régime de diffusion.

4.4 Flammes sprays dans un jet fluctuant

Une remarque doit être faite concernant les structures de flammes qui sont décrites dans cette section. Une flamme spray turbulente peut prendre plusieurs formes selon la configuration étudiée. La géométrie proposée dans cette partie concerne un spray de gouttes injecté comme un jet, la phase porteuse étant l'oxydant présent dans l'écoulement externe. Les structures de flammes peuvent être différentes pour d'autres modes d'injection ou pour une géométrie différente.

4.4.1 Paramètres de référence

Les paramètres d'étude concernant le spray, la turbulence et la combustion (STC) doivent être définis. Le choix a été fait en considérant que la variation de l'un de ces paramètres pourrait conduire à une modification sensible des régimes de combustion et/ou des structures de flammes. La plupart des paramètres caractéristiques STC ont déjà été définis auparavant mais ils sont rappelés ici. Pour le spray, une première donnée importante est le rapport d'équivalence du liquide injecté Φ_{LO}^I qui va déterminer la richesse de l'écoulement. Le temps d'évaporation des gouttes τ_v et le temps cinétique τ_p qui sont tous les deux proportionnels à la surface des gouttes sont également nécessaires. Enfin, la distance moyenne inter-gouttes, définie par $\delta_S = (d^I)^{-1/3}$ peut être déduite des paramètres précédents. Le principal paramètre normalisé concernant les interactions spray/turbulence est le nombre de Stokes $S_o = \tau_p/\tau_k$. Pour une description complète des flammes sprays turbulentes, tous les cas $l > \eta > \delta_S$, $\delta_S > l > \eta$ and $l > \delta_S > \eta$ devraient être décrits. Cependant, en première approche, seuls les cas où l'échelle intégrale l est plus grande que l'espace inter-gouttes sont étudiés. Cela implique que pour un nombre de Stokes S_o assez grand, le spray peut former des poches, dont la taille est approximativement l . Du point de vue de la combustion, l'épaisseur de flamme et le temps caractéristique (δ_f et τ_f , resp.) sont les principaux paramètres de référence. Les deux rapports τ_v/τ_f et δ_S/δ_f sont les bases de toute description des structures de flamme. Les effets de la turbulence sur la combustion ont été réduits à leur minimum. En effet, un diagramme complet est généralement nécessaire pour les définir [53]. Bien qu'il ait été prouvé qu'ils avaient quelques effets sur les interactions STC, d'autres phénomènes moins importants ont également été négligés.

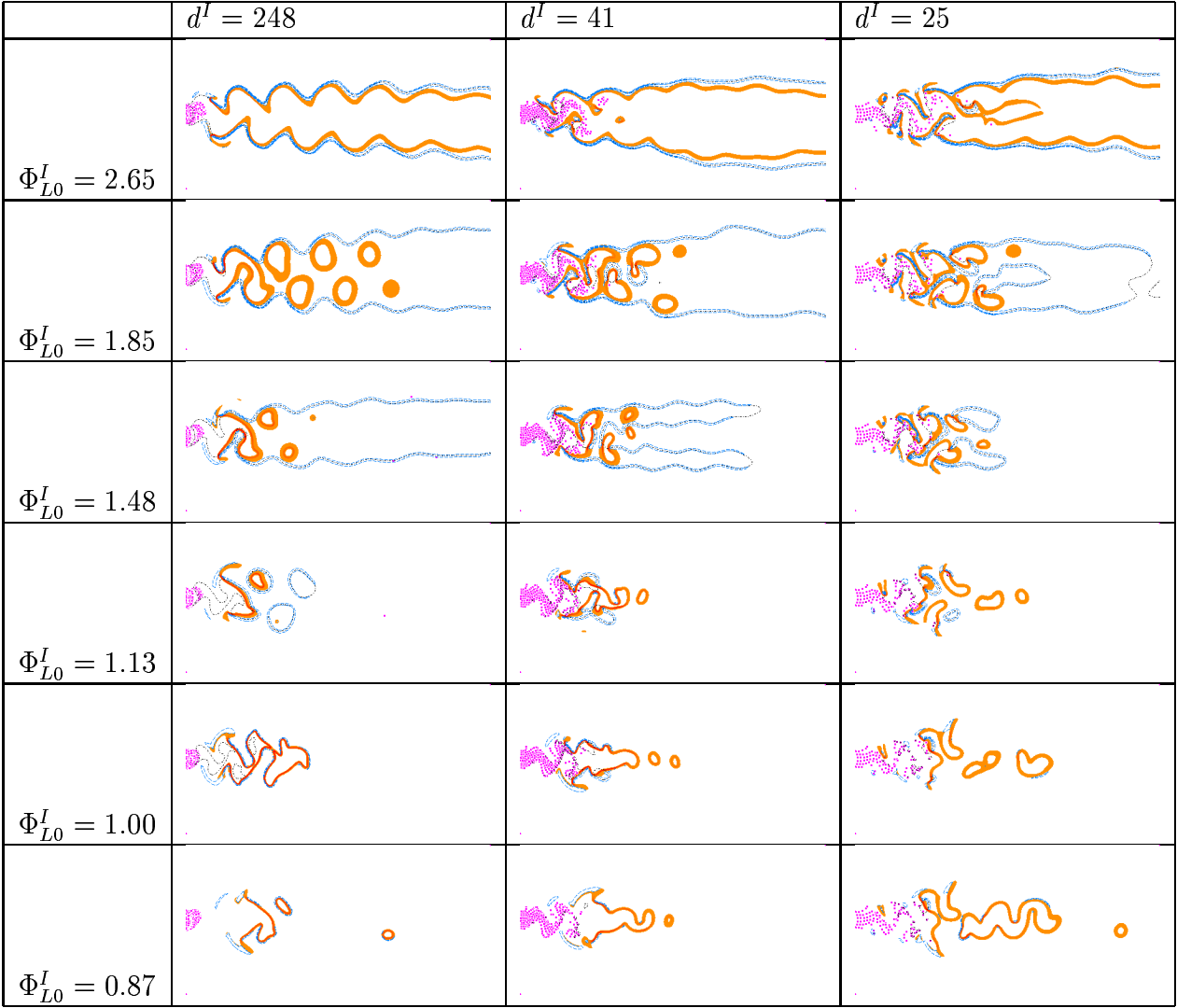
Pour résumer, quatre paramètres généraux sont nécessaires pour développer un diagramme de la combustion turbulente de spray : τ_v/τ_f , δ_S/δ_f , Φ_{L0}^I , τ_p/τ_k . En effet, la modification de l'un de ces paramètres peut affecter fortement la structure de flamme en modifiant les paramètres locaux de l'écoulement. Il n'est pas facile de représenter un diagramme dans un espace à quatre dimensions. Cependant, le paramètre τ_k est resté constant dans l'ensemble des simulations. Nous avons donc réduit notre diagramme à trois dimensions sachant que τ_p et τ_k sont deux fonctions de la surface des gouttes et sont donc linéairement liés. Typiquement, les grosses gouttes ont à la fois un temps d'évaporation long et un grand nombre de Stokes.

4.4.2 Régimes de combustion et dégagement de chaleur

Dans cette section, les structures de flammes ont été étudiées selon deux axes qui sont indiqués dans le tableau 4.4. L'axe vertical indique le rapport d'équivalence de l'injection (Φ_{L0}^I) et l'axe horizontal représente la densité des poches de gouttes et, par ailleurs, leur temps caractéristique d'évaporation. Dans chaque cellule du tableau, les régimes de combustion de la flamme correspondante sont représentés avec le spray pour un temps de simulation donné $t = 17.15 * \tau_f = 51\tau_J$. Ce temps est le moment initial à partir duquel tous les calculs statistiques ont été réalisés dans cette partie.

Deux évolutions séparées des structures de flammes peuvent être observées dans le tableau 4.4 : le long de l'axe vertical, la variation du rapport d'équivalence local injecté (Φ_{L0}^I) affecte le régime de flamme alors que le long de l'axe horizontal, la variation de d^I (ou τ_v/τ_f) affecte directement la structure de flamme par l'apparition de nombreuses poches et discontinuités locales.

En partant du cas **FST-D248-ER087**, il est possible d'observer la propagation d'une flamme prémélangée pauvre (de rapport d'équivalence injecté $\Phi_{L0}^I = 0.87$). Le champ de fraction de mélange n'atteint jamais sa valeur stœchiométrique dans les trois cas pauvres ***-ER087** bien que les perturbations de vitesses puissent créer des poches de gouttes entraînant des niveaux de fraction de mélange locale élevés. Néanmoins, la flamme prémélangée est associée à la flamme de diffusion dans un système de propagation d'un front de flamme double. La propagation d'une flamme double est observée dans d'autres configurations, principalement quand le rapport d'équivalence de l'injection est proche de 1 et que le temps d'évaporation des gouttes



TAB. 4.4 – Taux de réaction instantané des simulations **FST-***. En couleur (orange) : flammes prémélangées, en pointillés (bleu) : flammes de diffusion, symboles (fushia) : gouttes.

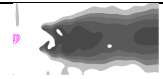
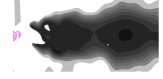
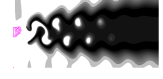
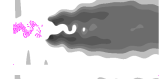
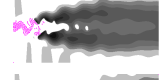
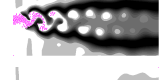
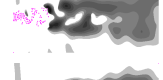
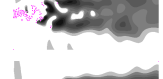
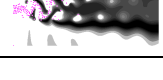
est court. Ces flammes mélangées sont prédominantes dans les trois cas suivants : **FST-D248-(ER087,ER1,ER113)** mais elles peuvent apparaître localement dans d'autres simulations. Une description détaillée de ces structures de flamme double est présentée plus loin.

Si la flamme double dans le cas **FST-D248-ER087** se propage avec une front vertical, dès que le rapport d'équivalence injecté Φ_{L0}^I augmente, la structure générale de la flamme est plus ou moins horizontale (ou ouverte). Alors, en considérant les cas à évaporation rapide ***-D248-**, il est possible d'observer l'apparition de flammes non-prémélangées ancrées au niveau de points triples (**FST-D248-(ER148,ER185,ER265)**). En effet, la fraction de mélange augmente dans l'écoulement central, et il est encore possible de maintenir un régime prémélangé riche mais le combustible qui est parvenu à traverser le premier front prémélangé riche réagit avec l'écoulement externe d'oxydant. Cette flamme de diffusion est centrée sur le niveau de l'isofraction de mélange stoechiométrique. Quand Φ_{L0}^I augmente, la flamme prémélangée riche centrale continue n'est plus maintenue. Elle est tout d'abord divisée en poches prémélangées puis, pour un rapport d'équivalence vraiment élevé (**FST-D248-ER265**), la flamme prémélangée est totalement rejetée de l'écoulement central et se maintient à l'extrémité du champ de fraction de mélange.

Le dégagement de chaleur est représenté dans le tableau 4.5 à travers le niveau de température (colonne de gauche). Dans les cas ***-ER087**, il est possible d'observer un dégagement de chaleur initial faible à cause d'un front prémélangé pauvre qui se propage et qui est loin de niveau stoechiométrique. Au fur et à mesure que Φ_{L0}^I est augmenté et que la flamme prémélangée riche centrale est maintenue, le dégagement de chaleur global des configurations augmente également. Cependant, dès que le rapport d'équivalence injecté est trop élevé, la flamme prémélangée centrale est moins efficace et le dégagement de chaleur diminue.

L'effet de la variation du rapport d'équivalence injecté étant connu dans les cas où les gouttes s'évaporent bien avant d'atteindre le front de flamme, il est maintenant intéressant de se focaliser sur l'évolution de la structure de flamme quand les temps caractéristiques d'évaporation diminuent.

Pour conserver un rapport d'équivalence constant lorsque le temps d'évaporation des gouttes augmente, il faut injecter des gouttes en moins grande quantité mais plus lourdes. En faisant cela, non seulement le temps d'évaporation des gouttes augmente mais également leur temps

	Code	s_0/δ_f^2	τ_v/τ_f	τ_k/τ_J	Φ_{L0}^I
	FST-D248-ER087	$2.37E - 4$	$2.6E - 2$	$4.37E - 2$	0.87
	FST-D248-ER1	$2.59E - 4$	$2.84E - 2$	$4.8E - 2$	1.00
	FST-D248-ER113	$2.81E - 4$	$3.1E - 2$	$5.2E - 2$	1.13
	FST-D248-ER148	$3.37E - 4$	$3.7E - 2$	$6.2E - 2$	1.48
	FST-D248-ER185	$3.91E - 4$	$4.3E - 2$	$7.2E - 2$	1.85
	FST-D248-ER265	$4.96E - 4$	$5.4E - 2$	$9.2E - 2$	2.65
	FST-D041-ER087	$1.77E - 3$	0.19	0.33	0.87
	FST-D041-ER1	$1.94E - 3$	0.21	0.36	1
	FST-D041-ER113	$2.10E - 4$	0.23	0.39	1.13
	FST-D041-ER148	$2.52E - 3$	0.28	0.47	1.48
	FST-D041-ER185	$2.93E - 3$	0.32	0.54	1.85
	FST-D041-ER265	$3.71E - 3$	0.41	0.69	2.65
	FST-D025-ER087	$3.5E - 3$	0.38	0.65	0.87
	FST-D025-ER1	$3.83E - 2$	0.42	0.71	1.00
	FST-D025-ER113	$4.16E - 3$	0.46	0.77	1.13
	FST-D025-ER148	$5E - 3$	0.55	0.92	1.48
	FST-D025-ER185	$5.78E - 3$	0.64	1.07	1.85
	FST-D025-ER265	$7.34E - 3$	0.81	1.35	2.65

TAB. 4.5 – Résumé des configurations fluctuantes.

cinétique. Ainsi, le spray subit principalement les fluctuations des grandes échelles alors que les petites échelles n'auront pas d'effet sur le mélange local des gouttes. Par conséquent, les poches de gouttes sont clairement formées par l'agitation du jet et les processus de combustion prennent place autour de ces poches. A cause des temps d'évaporation plus grands que dans les cas ***-D248***, les fronts de flamme et les gouttes coexistent même si les gouttes ne sont pas assez grosses pour traverser entièrement les flammes.

En observant dans le tableau 4.4 les configurations proches d'un rapport d'équivalence unitaire (***-ER087**, ***-ER1** et ***-ER113**), il est possible de noter que l'augmentation du temps d'évaporation affecte la structure de flamme alors que le régime de combustion général reste identique. Dans les simulations **FST-D041-(ER087,ER1,ER113)**, la principale flamme prémélangée est principalement en forme de V et est stabilisée par une structure de flamme double, comme pour les cas à évaporation rapide. A cause d'un fort taux de ségrégation des gouttes, la fraction de mélange peut atteindre et dépasser son niveau stoechiométrique. Dans ce cas, après le front de stabilisation, la flamme prémélangée passe localement d'un régime pauvre à un régime riche et la flamme de diffusion est détachée de la structure de double flamme et forme un anneau délimité par le niveau stoechiométrique de Z . Les anneaux brûlent le combustible qui est parvenu à traverser la zone riche du front prémélangé. Par la suite, vers la queue de la flamme et selon les fluctuations de la fraction de mélange, des anneaux de flammes entièrement prémélangées sont générés par les extinctions dûes à un niveau local faible de combustible. Si les temps d'évaporation augmentent encore (**FST-D025-(ER087,ER1,ER113)**), le front de flamme devient plus perturbé et perd sa forme en V continue. Toutefois, les diverses structures de flamme observées précédemment peuvent être reconnues avec un front prémélangé principal alternant entre régimes pauvre et riche. D'un point de vue général, dans ces régimes proches de la stoechiométrie, le front de flamme agit très dynamiquement. Il adapte son comportement et sa structure pour brûler le plus efficacement possible le combustible évaporé.

Considérons à présent le cas où le combustible injecté est localement riche et loin de la stoechiométrie, même si le rapport d'équivalence global du brûleur reste pauvre. Si nous prenons tout d'abord le cas **FST-D041-ER148**, il est possible d'observer une nouvelle structure générale de flamme avec une quadruple queue de diffusion ou un régime de diffusion central. En fait, cette structure peut être généralement observée dans les simulations avec des gouttes lourdes. En

effet, les fluctuations de l'écoulement génèrent deux jets principaux de combustible en éjectant les gouttes alternativement des deux côtés de la ligne de symétrie ($y = 0$). Le long de cette ligne centrale, le jet d'oxydant gazeux est convecté sans aucune goutte. Par conséquent, en suivant la direction transversale, on obtient les couches successives suivantes : oxydant, combustible, oxydant (ligne de symétrie), combustible et finalement oxydant. Un système à double stabilisation vient juste d'être créé avec, de chaque côté de la ligne $y = 0$ des fronts prémélangés et des flammes de diffusion accrochées à des points triples. Si le temps d'évaporation augmente encore (**FST-D025-ER148**), ce comportement général est toujours observé mais avec un front de flamme beaucoup plus perturbé et une propagation concentrée sur les poches locales de gouttes plutôt que sur l'ensemble du spray.

D'un point de vue général, et en considérant le tableau 4.4, quand le temps d'évaporation (et par conséquent le temps cinétique) augmente, la structure de flamme passe d'un régime de stabilisation global à un système de propagation locale de fronts de flamme multiple. C'est le cas pour l'ensemble des simulations excepté quand le rapport d'équivalence injecté est vraiment élevé ***-ER265**. Dans ce cas, le rapport d'équivalence du jet central atteint si rapidement un niveau élevé qu'aucun front de flamme n'est capable de se propager et la structure de flamme est vraiment similaire à une flamme gazeuse se propageant autour d'un noyau de combustible pur.

4.4.3 Etude des structures de flamme

Cette partie est dédiée à la description locale de diverses structures de flammes qui ont été observées dans toute la base de données.

Les flammes doubles sont souvent rencontrées dans les simulations. Elles peuvent être observées comme structures localisées mais aussi comme régime courant (planche P4.5.-a). La condition pour observer ces flammes est de brûler un mélange de combustible liquide ou gazeux prémélangé avec un oxydant. Dans ce cas, une flamme prémélangée se propage. A travers la flamme, le niveau d'oxydant diminue considérablement ou presque totalement. Si parmi les gaz brûlés, derrière la flamme, la quantité d'oxydant augmente encore (à cause d'un effet convectif, par exemple, ou d'une pénétration de la flamme dans les gaz frais), l'arrière de la flamme peut être alimenté par l'oxydant. Le signe du gradient d'oxydant est alors inverse au

gradient restant de carburant et la combustion passe d'un régime prémélangé à un régime non-prémélangé comme nous pouvons le voir planche P4.5.-b. Un exemple de structure de flamme double provenant des bases de données DNS est montré planche P4.5.-c. Des fronts de flammes doubles complètes ainsi que des anneaux de flammes doubles peuvent être générés. Cependant, le mélange a besoin d'être principalement pauvre ou proche de la stoechiométrie de sorte que la flamme de diffusion reste près du front de propagation prémélangé. Si le mélange est riche, tout l'oxydant va être consommé par la flamme prémélangée et une flamme de diffusion plus classique va se détacher.

Une première évolution logique de l'anneau de flamme double est la création d'un anneau de diffusion. Si le groupe de gouttes est enveloppé par une flamme double, soit le rapport d'équivalence liquide local est pauvre et un anneau de flamme double va brûler jusqu'à disparition des gouttes et de l'oxydant gazeux (planche P4.6.-a), soit le mélange est riche et une flamme prémélangée interne va se propager et brûler l'oxydant à l'intérieur de l'anneau (planche P4.6.-b). Ensuite, une flamme de diffusion brûle le combustible restant et l'oxydant externe (planche P4.6.-c).

Si à la place d'un anneau initial de flamme double, un front de flamme entier se propage dans un mélange de gouttes (planche P4.6.-a') avec des fluctuations locales riches, le combustible gazeux qui tente de traverser le front de flamme arrache la flamme de diffusion de l'arrière de la flamme prémélangée (planche P4.6.-b'). En faisant cela, et s'il reste une zone pauvre devant le front de flamme prémélangée, des structures de flammes triples apparaissent (planche P4.6.-c').

Les structures de flamme précédentes sont principalement locales. Toutefois, la combustion de spray turbulente peut conduire à des structures plus générales, bien que spécifiques de la combustion à deux phases. Une de ces structures vraiment courante apparaît quand le nombre de Stokes des gouttes (et par conséquent le temps d'évaporation) est très élevé. Dans ce cas, les grandes structures turbulentes génèrent des poches de gouttes qui suivent l'ouverture du jet. Par conséquent, il ne reste plus de gouttes dans le jet central principal et seul l'oxydant est présent. L'écoulement central pauvre mène, quand la combustion a lieu, à une flamme de diffusion centrale qui peut être appelée "externe" puisqu'elle englobe toute la zone où les gouttes se sont évaporées. De l'autre côté des poches de gouttes en évaporation, une seconde flamme de diffusion externe se développe. Elle est alimentée par l'oxydant injecté avec le coflow. Sur la

planche P4.7. sont présentés quelques exemples de régimes de flamme de diffusion centrale avec un profil selon la direction transversale où les couches successives d'oxydant (coflow), de combustible (poches), d'oxydant (jet central), de combustible (poches), et d'oxydant (coflow), peuvent être observées. Entre ces couches, un taux de réaction de diffusion est observé. Ce taux de réaction est courant sur les côtés des coflows à cause des gaz préchauffés.

Enfin, sur la planche P4.8., on peut observer un régime plus inhabituel avec une flamme prémélangée centrale. Cette flamme, apparaissant pour des injections riches de gouttes lourdes, est due à la présence de produits chauds dans le jet central. En effet, en raison de la richesse de l'écoulement et même si les gouttes sont éjectées de chaque côté du jet, un niveau de combustible proche de la stoechiométrie est maintenu dans le jet central. Ce mélange brûle très rapidement en quittant le jet central de gaz chauds. Ces gaz chauds permettent le développement de deux flammes prémélangées riches face à la zone où sont éjectées les poches de gouttes. Sur les côtés du coflow du jet, une flamme prémélangée 'externe' classique se développe également, suivie par une flamme de diffusion.

De même, en observant ces structures globales et locales de flammes, il semble que la combustion adapte toujours son comportement pour que la consommation de combustible qui dépend des conditions d'injection et de l'écoulement turbulent local, soit optimale. Les flammes prémélangées brûlent intensivement ce que nous pouvons appeler le mélange 'évident', c'est-à-dire l'oxydant et le combustible gazeux déjà mélangés. Cette flamme augmente la température générale dans l'écoulement et aide à vaporiser les gouttes restantes, s'il y en a. Ensuite, la flamme de diffusion prend le relai et parvient à brûler autant que possible le combustible restant.

4.4.4 Diagramme de combustion

Le développement final de ce chapitre est l'élaboration d'un diagramme de combustion pour la combustion turbulente de spray. Le problème peut être à nouveau énoncé : un spray de gouttes est injecté avec la partie principale du jet fluctuant. Quels sont les modes possibles de combustion du combustible suivant le rapport d'équivalence du jet, le diamètre moyen des gouttes (ou le temps d'évaporation) et l'effet de dispersion dû aux structures turbulentes ?

Les structures de flammes détaillées précédemment peuvent être repertoriées en trois caté-

gories principales, elles-mêmes pouvant se diviser en sous-catégories :

1. **Combustion externe :** Elle concerne les flammes se développant autour du jet, soit en brûlant tout le combustible injecté avec un front de flamme unique englobant les gouttes et le combustible gazeux (régime externe fermé, planche P4.9.-(a)), soit en brûlant les côtés du coflow du jet (régime externe ouvert, planche P4.9.-(b)).
2. **Combustion en groupe :** La combustion en groupe consiste à brûler le spray en le dédoublant en plusieurs groupes de gouttes avec des régimes de combustion indépendants pour chaque poche. Dans ce cas, les poches de flammes prémélangées et de diffusion sont courantes (planche P4.9.-(c)).
3. **Combustion mixte :** Le régime mixte est une combinaison des deux précédents. Les flammes prémélangées brûlent dans un mode de combustion de groupe alors que la flamme de diffusion n'est pas capable de passer entre les poches de gouttes à cause d'un niveau trop élevé de combustible. Par conséquent, le combustible restant est brûlé avec une flamme de diffusion externe avec l'oxydant gazeux du coflow (planche P4.9.-(d)).

D'après les bases de données DNS, le taux de combustion prémélangé Ξ_p intégré selon la direction transversale est représenté en fonction de la direction longitudinale. Le régime externe fermé peut être vu planche P4.10.-(a). Ce régime, concernant les écoulements pauvres est pleinement prémélangé jusqu'à ce que le combustible soit complètement consommé. D'un autre côté, la structure externe ouverte (planche P4.10.-(b)) montre un équilibre entre les régimes de diffusion et prémélangé après le front de stabilisation prémélangé.

Ce régime de groupe (planche P4.10.-(c)) est légèrement différent. Après des extrémités de flamme prémélangées stabilisantes prépondérantes, des poches de flammes prémélangées et de diffusion sont formées. Les dernières traces de combustible disparaissent avec les poches non-prémélangées. Enfin, le régime mixte (planche P4.10.-(d)) révèle un plus grand front prémélangé suivi par une unique flamme de diffusion suivant toute la direction longitudinale.

L'objectif est de situer ces structures générales de flamme dans un diagramme de combustion. Dans notre cas, trois dimensions sont nécessaires pour décrire correctement la combustion turbulente de spray: $\tau_v/\tau_f, \delta_s/\delta_f$ et Φ_{L0}^I . Mais rappelons-nous que les paramètres turbulents (ou fluctuant) sont fixés, tout comme les propriétés des flammes. Autrement, au moins deux directions supplémentaires seraient nécessaires.

Tout d'abord, précisons que les cas limites définis par Borghi [2] dans le cas d'un spray laminaire sont presque similaires à notre cas de jet turbulent. Si le temps d'évaporation de toutes les gouttes injectées est très petit par rapport au temps caractéristique de la flamme ($\tau_v/\tau_f \ll 1$) alors, une combustion purement gazeuse a lieu. Cependant, parce que les gouttelettes peuvent avoir modifiées quelques structures turbulentes tout en se vaporisant, la topologie du combustible gazeux (et donc de la fraction de mélange) peut être légèrement non homogène. Par conséquent, la flamme turbulente se propageant à travers ce milieu a différents régimes et structures identiques à ceux des flammes à deux phases. La frontière entre la combustion purement gazeuse et à deux phases n'est pas bien définie. En effet, même si τ_v/τ_f n'est que très peu inférieur à l'unité, des groupes de gouttes peuvent atteindre le front de flamme tout en étant protégés des gaz chauds externes par d'autres gouttes en évaporation contenant des poches de gaz dont la température locale est plus faible. Par conséquent, les points suivants peuvent être proposés : si $\tau_v/\tau_f \ll 1$ les gouttes sont évaporées loin devant le front de flamme, si $\tau_v/\tau_f \leq 1$, les gouttes atteignent la flamme sans être capables de la traverser avant d'être évaporées. Enfin, si $\tau_v/\tau_f > 1$ les gouttes sont capables de traverser le front de flamme et elles s'évaporent toujours derrière la flamme. Le second cas limite de notre diagramme est l'espace inter gouttes ou poches de gouttes. En effet, si les gouttes sont vraiment proches les unes des autres ($\delta_s/\delta_f \ll 1$), la flamme ne peut avoir que deux comportements possibles : soit elle est capable de se propager à travers le nuage de gouttes avec une épaisseur d'environ la largeur du nuage, soit une combustion externe du spray s'établit. La traversée du spray par la flamme peut être réalisée dans une zone limitée très haute où le temps de chauffage de l'oxydant gazeux mentionné précédemment joue un rôle important. En fait, la flamme est capable de se propager seulement si le rapport d'équivalence gazeux autour des gouttes est proche de l'unité. Enfin, plus les gouttes sont grosses, plus le temps d'évaporation a besoin d'être long. Cette limite d'épaisseur de flamme a été représentée planche P4.11. dans le plan $(\tau_v/\tau_f, \Phi_{L0}^I)$ du diagramme 3-D. La surface courbée délimitée par les pointillés dans ce plan représente la zone où la flamme peut se propager à travers le combustible injecté en fonction du rapport d'équivalence local.

Dans le diagramme représenté P4.11., les structures de flamme ont été réparties en trois catégories principales : combustion externe, combustion de groupe, et combustion mixte. Nous pouvons rencontrer ces modes de combustion en suivant l'évolution de la flamme quand l'es-

pace inter gouttes moyen reste constant. Dans ce cas, le rapport d'équivalence injecté est augmenté, comme le temps d'évaporation. Prenons les cas **FST-D041-ER*** allant de **FST-D041-ER087** à **FST-D041-ER265**. Le rapport d'équivalence varie de $\Phi_{L0}^I = 0.87$ à $\Phi_{L0}^I = 2.65$ (tab. 4.5) et le temps d'évaporation reste du même ordre de grandeur ($0.19 \leq \tau_v/\tau_f \leq 0.41$). Le lecteur peut se référer au tableau 4.5 pour une description visuelle de l'évolution de la flamme.

Tout d'abord, dans le cas le plus pauvre (**FST-D041-ER087**), un régime de flamme double peut être observé. La flamme double est plissée mais reste continue autour du combustible provenant de l'évaporation du spray. Ce régime peut être assimilé à de la combustion externe bien que quelques poches peuvent apparaître de temps en temps dans la simulation. Lorsque le rapport d'équivalence liquide injecté augmente, des fluctuations locales de la fraction de mélange apparaissent à cause de la ségrégation des gouttes. Ensuite, la combustion de groupe a lieu. Plus l'espace inter-gouttes est grand, plus le régime de groupe apparaît rapidement (**FST-D248-ER113**, **FST-D025-ER265**). Il peut être décrit par la propagation de fronts de flamme discontinus autour de groupes de gouttes. Les poches de gouttes brûlent toujours individuellement sans aucune interaction. Même dans le cas où les gouttes s'évaporent loin devant le front de flamme, un régime de combustion en groupe peut être détecté autour des fluctuations de la fraction de mélange (**FST-D025-ER265**). Ce régime de combustion de groupe concerne en premier lieu les flammes prémélangées et de diffusion quand le rapport d'équivalence injecté est riche mais proche de la stoechiométrie. Dans ce cas, autour des poches de gouttes, la fraction de mélange s'approche de sa stoechiométrie et la combustion non-prémélangée est possible. Cependant, si Φ_{L0}^I augmente encore, le mélange commence à devenir très riche et si, les flammes en groupe prémélangées riches se propagent au centre du spray, la flamme de diffusion reste externe (**FST-(D248,D041,D025)-ER185**). Elle brûle le combustible restant de la combustion prémélangée riche intérieure et de l'oxydant situé à l'extérieur et apporté par le coflow. Ensuite, si Φ_{L0}^I augmente encore et atteint un niveau très élevé, la combustion au centre du spray ne peut plus être maintenue, et les flammes pré-mélangées et non-prémélangées sont alors poussées en dehors du jet et brûlent dans un régime de combustion externe. Ce régime externe est appelé 'régime externe ouvert' en référence au jet riche central de combustible où aucune combustion ne peut être maintenue. Par opposition, un régime externe fermé arrive quand l'injection est pauvre et que la flamme est capable de se propager dans la partie principale du jet.

Il est maintenant intéressant de comparer quelques structures de flammes qui ont été numériquement observées avec quelques résultats expérimentaux. Dans une configuration de jet, il est toujours difficile de comparer la DNS avec des résultats expérimentaux, la DNS étant restreinte aux petites géométries [53]. Toutefois, si les rapports d'échelles sont respectés, des résultats qualitatifs peuvent être comparés comme sur la planche P4.12.. Sur cette figure, les résultats expérimentaux de Cessou & Stepowski [10] ont été comparés avec les simulations. Trois structures de flammes différentes sont représentées : un régime externe ouvert, un régime mixte, et enfin un régime de diffusion central. Dans ces comparaisons, la DNS montre sa capacité à capturer la physique des flammes turbulentes à deux phases.

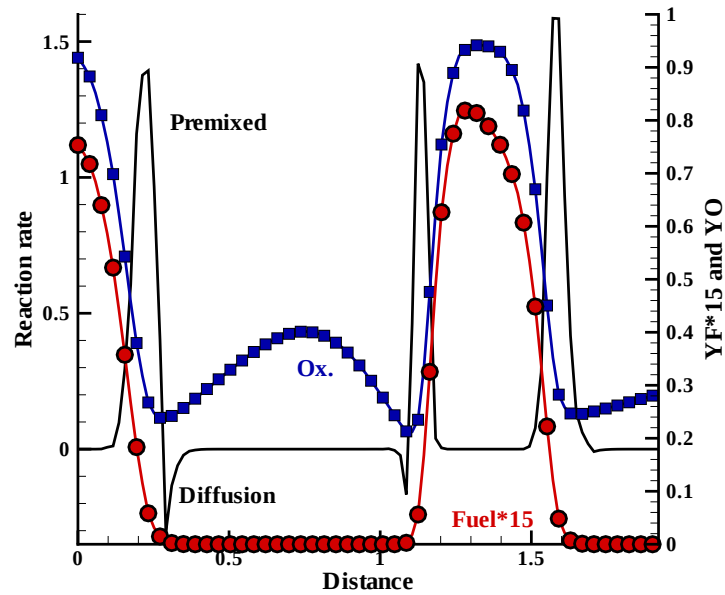
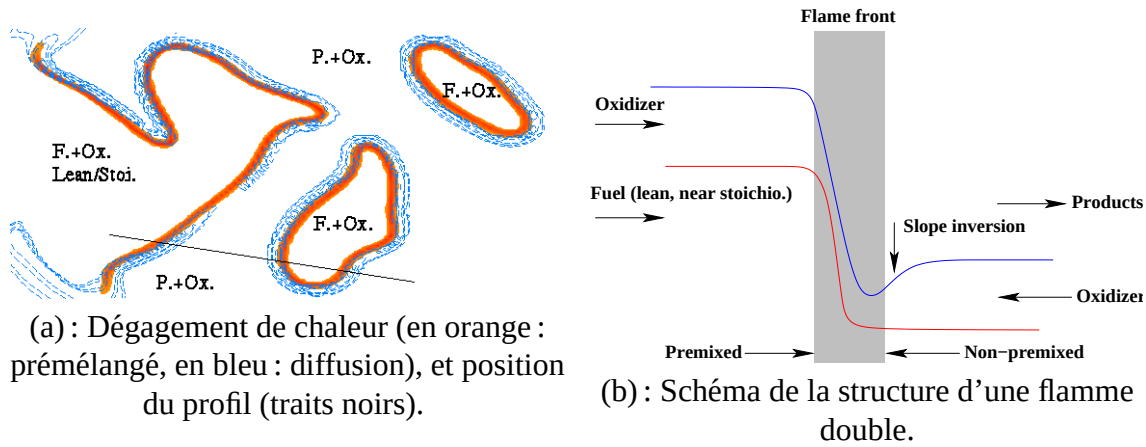
4.5 Conclusion

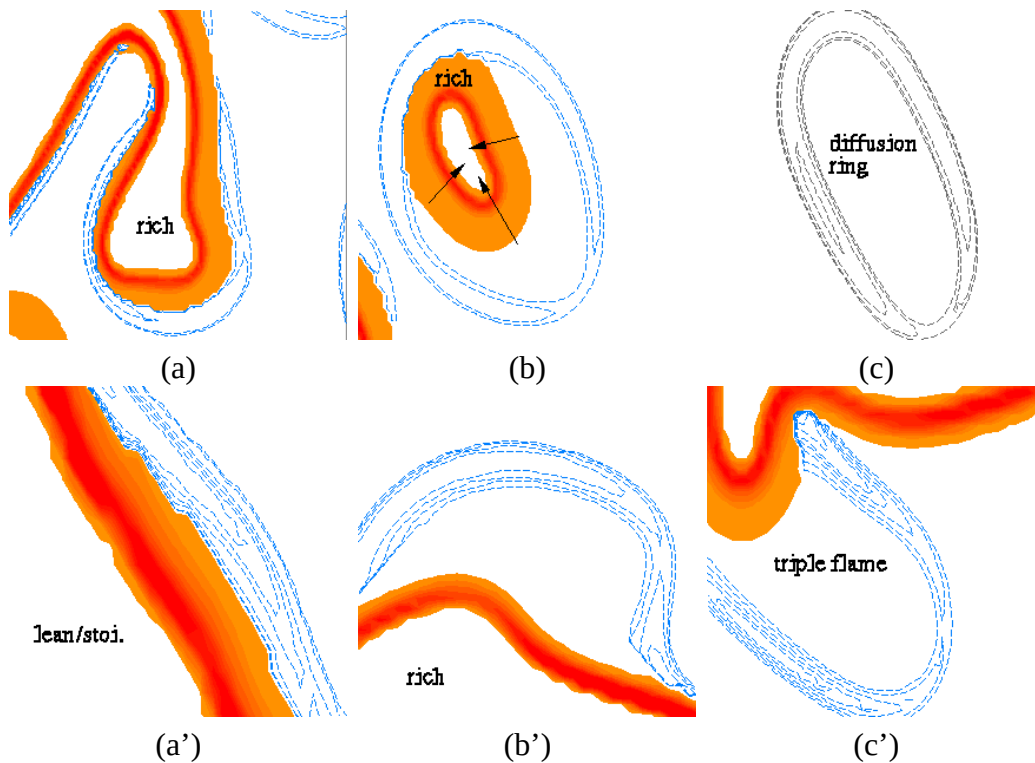
Pour la première fois, des simulations numériques directes de flammes sprays fluctuantes ont été réalisées. Des flammes laminares ont tout d'abord été étudiées. Leurs structures ont été détaillées dans l'espace physique ainsi que dans l'espace de la fraction de mélange. Nous avons vu qu'une structure de flamme triple classique se développe autour du spray si un mélange riche est impliqué. Pour des sprays pauvres ou stoechiométriques, une flamme prémélangée pauvre se propage. Dans ces simulations, le temps d'évaporation des gouttes est très court, par conséquent, la structure de fraction de mélange est similaire à celle d'une flamme gazeuse, bien que, à cause de notre définition de la fraction de mélange, aucun point ne soit défini au delà d'une valeur limite de Z .

Suivant la première analyse, une nouvelle configuration a été réalisée : les gouttes ont été injectées dans un jet avec de fortes fluctuations, la taille et la fréquence des plus grandes structures étant imposées. Un coflow préchauffé a été ajouté pour simuler la présence de gaz chauds en recirculation et pour allumer le mélange. Dix-huit simulations ont été effectuées avec différents paramètres d'injection pour un spray monodispersé (rapport d'équivalence, densité) alors que les fluctuations de l'écoulement et les propriétés de la flamme restent les mêmes.

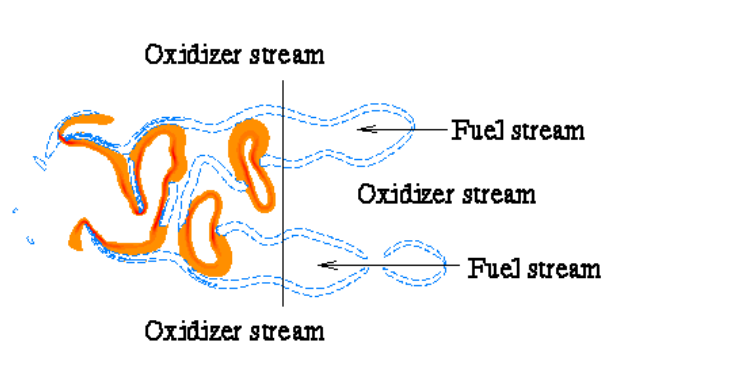
L'ensemble de la base de données nous permet de décrire les régimes de flammes locale et globale apparaissant dans la combustion de sprays. Ces régimes ont été répertoriés en quatre structures principales : régime externe ouvert et fermé, combustion de groupe et combustion

mixte. Un diagramme de combustion a été développé avec un nombre minimal de dimensions impliquant le temps d'évaporation des gouttes, l'espace moyen inter-gouttes ou groupes de gouttes, et enfin le rapport d'équivalence injecté.



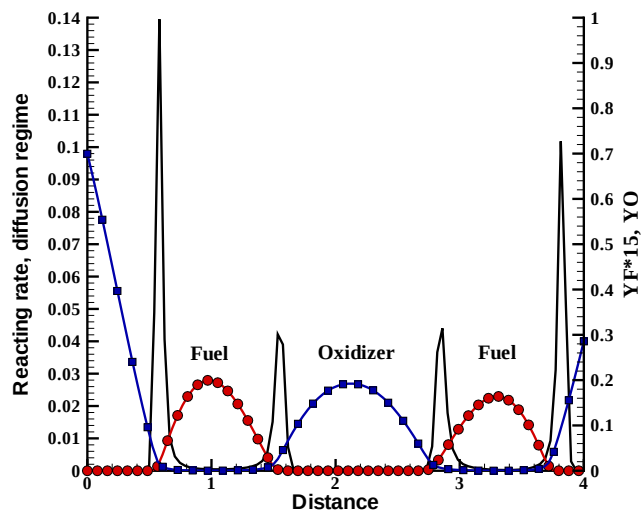


P4.6. - Evolution d'une flamme double, cas riche. En couleur : régime prémélangé, en pointillés : régime de diffusion. Ligne du haut : anneau de combustion (FST-D248-ER113): (a) formation de poche, (b) propagation d'un anneau de flamme prémélangée riche, (c) le combustible restant est brûlé dans un régime de diffusion. Ligne du bas : front de combustion (FST-D041-ER113): (a') flamme double, (b') les gaz frais sont alimentés par les gouttes ce qui conduit à un régime prémélangé riche, la flamme de diffusion est séparée de celle prémélangée, (c') formation d'une flamme triple.



P\$frag replacements

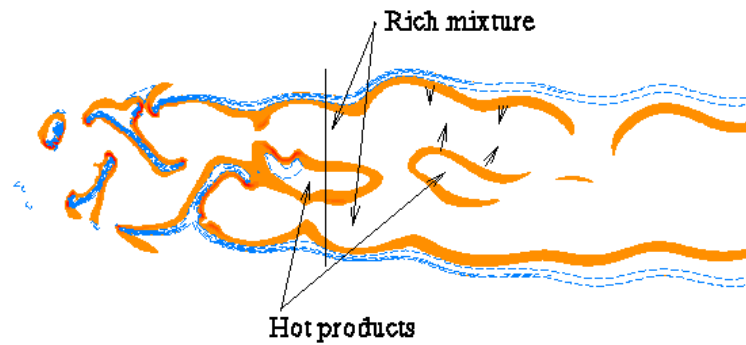
(a) : Taux de réaction (iso-contours), et position du profil (ligne noire)



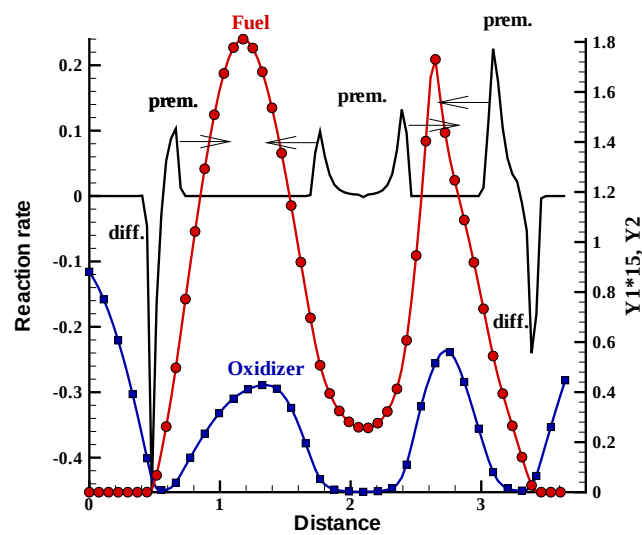
(b) : Profils du système de double diffusion. Lignes noires : taux de réaction prémélangé (positif) et non-prémélangé (négatif) , cercles : $Y_F * \Phi_s$, carrés : Y_O

P4.7. - Flamme de diffusion centrale, cas **FST-D041-ER113**.

PSfrag replacements

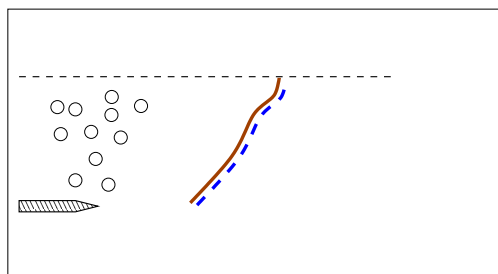


(a) : Taux de réaction (iso-contours), et position du profil (ligne noire)

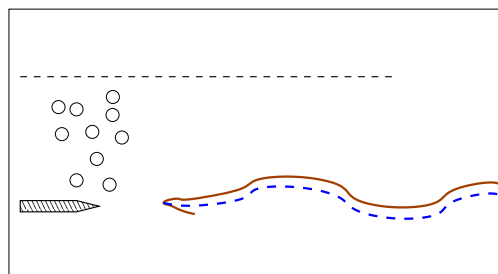


(b) : Profils du système prémélangé double

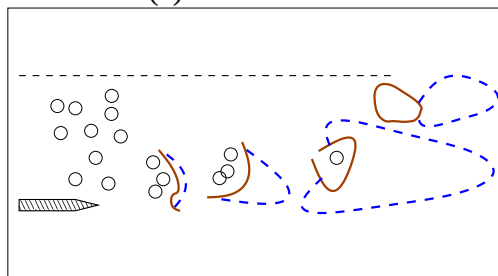
P4.8. - Régime prémélangé central, cas **FST-D025-ER265**. Lignes noires : taux de réaction prémélangé (positif) et non-prémélangé (négatif) , cercles : $Y_F * \Phi_s$, carrés : Y_O



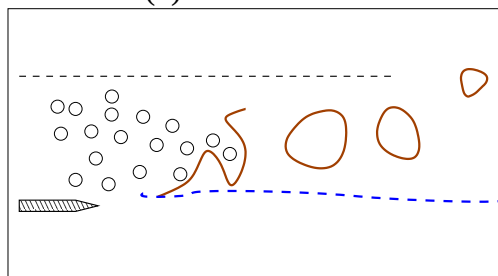
(a) : externe-fermé



(b) : externe-ouvert

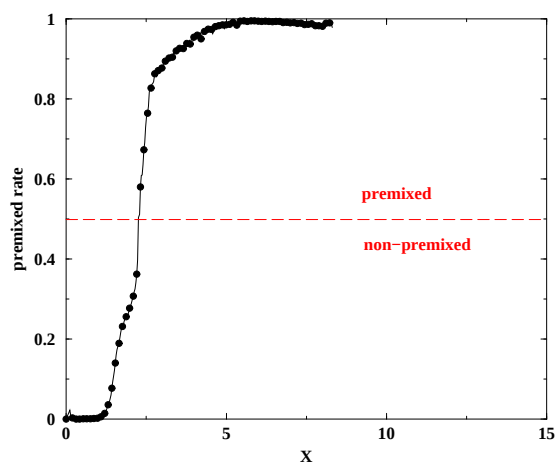


(c) : groupe

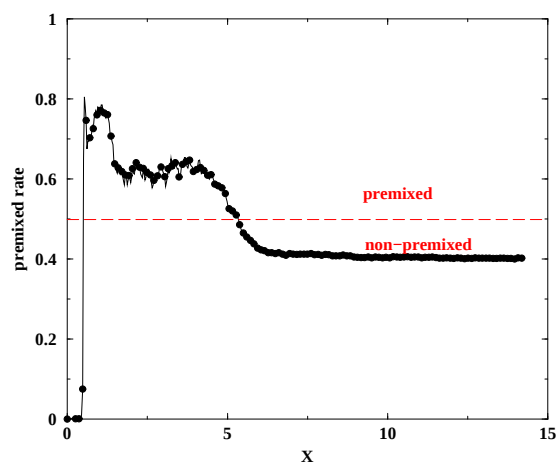


(d) : mixte

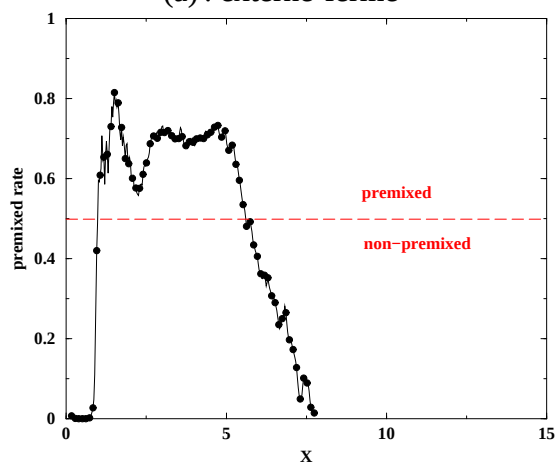
P4.9. - *Résumé des structures générales de flammes.*



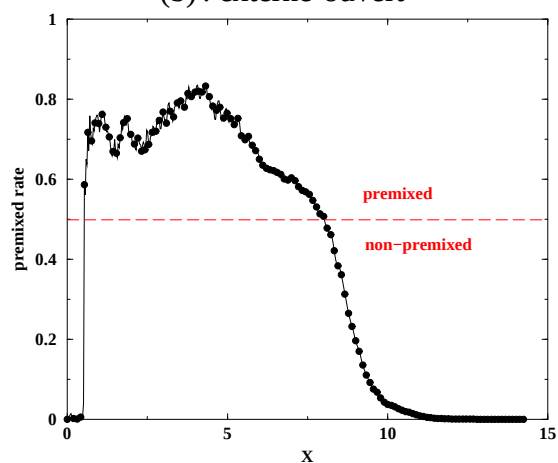
(a) : externe-fermé



(b) : externe-ouvert

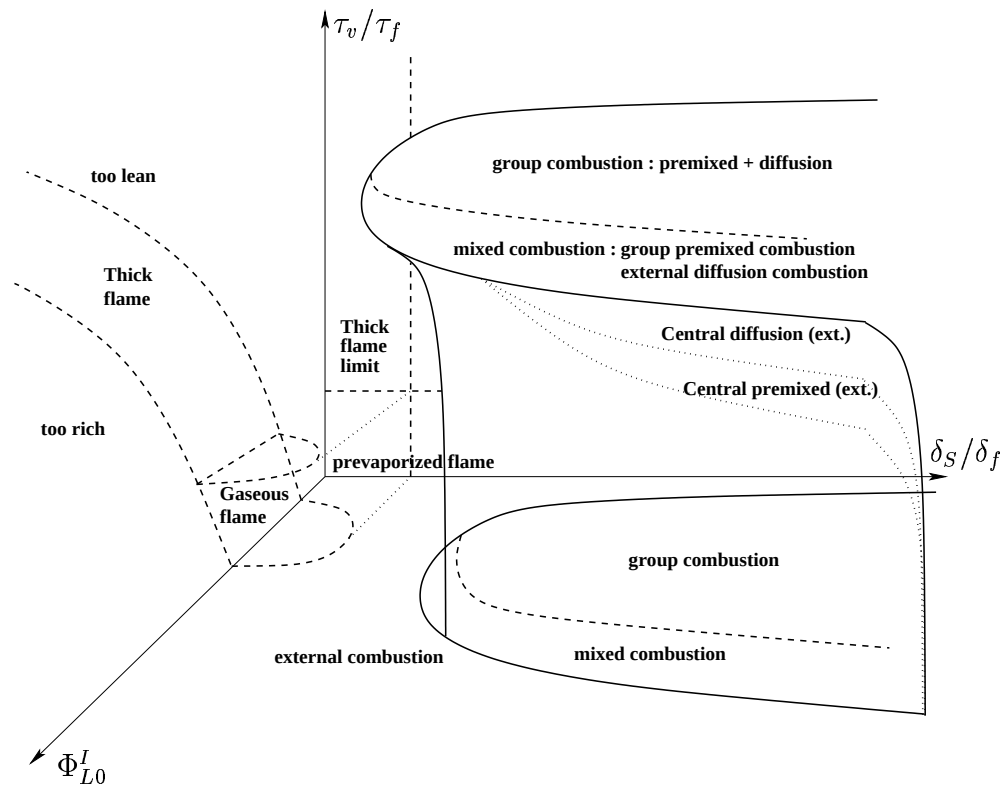


(c) : groupe

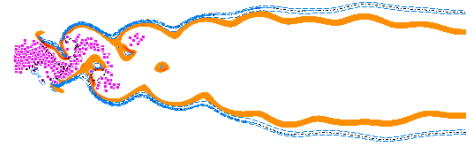
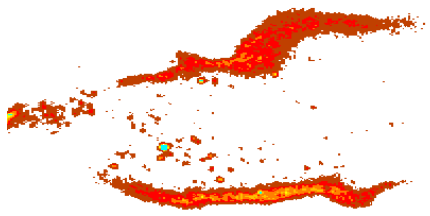


(d) : mixte

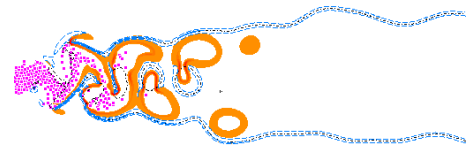
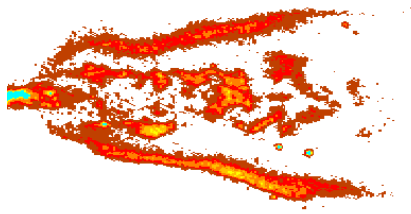
P4.10. - Taux prémélangé à travers les différentes structures de flammes : FST-D041-ER55 (a), FST-D041-ER265 (b), FST-D025-ER148 (c), FST-D041-ER185 (d).



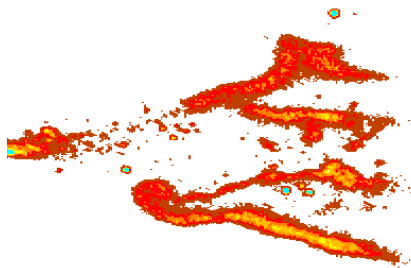
P4.11. - *Diagramme de combustion pour une flamme spray turbulente.*



(a) : régime externe ouvert



(b) : régime mixte



(c) : flamme de diffusion centrale

P4.12. - Comparaisons qualitatives (expérience/DNS) des structures de flammes sprays.
 Colonne de gauche : Expérience de Cessou et Stepowski [11], colonne de droite :
 FST-D041-ER113 (a), FST-D041-ER185 (b), FST-D041-ER265 (c)

Conclusion

Dans ce travail de thèse, nous nous sommes intéressés à l'étude de la combustion turbulente diphasique, et plus particulièrement à l'étude de la propagation et de la structure des flammes. Pour cela, nous avons utilisé la Simulation Numérique Directe (DNS). Dans un premier temps, une étude bibliographique nous a permis de mettre en évidence le fait que très peu de travaux se sont consacrés à la DNS de la combustion de sprays. En effet, l'ajout d'une phase supplémentaire au sein d'un écoulement gazeux s'avère être une opération délicate, c'est pourquoi un modèle est nécessaire pour la phase dispersée. Une description Lagrangienne pour les gouttes a donc été choisie et les équations nécessaires à la description de la phase dispersée ainsi qu'à la phase gazeuse ont été présentées.

Le second chapitre traite du modèle chimique utilisé. Pour modéliser les réactions entre le combustible et l'oxydant, diverses méthodes peuvent être utilisées. Une cinétique complète, qui prend en compte toutes les réactions de toutes les espèces chimiques est trop coûteuse en temps de calcul et les résultats sont parfois incertains. Une cinétique détaillée n'étant pas obligatoire dans les simulations numériques, lorsque l'on s'intéresse principalement à l'effet du dégagement de chaleur, une cinétique chimique réduite à une unique réaction irréversible à une étape a été utilisée. La loi d'Arrhenius qui est couramment utilisée pour décrire la cinétique globale a été modifiée car certains problèmes apparaissaient pour obtenir des coefficients stoechiométriques réalistes mais également dans le cas de la combustion d'un mélange non-stoechiométrique. Nous avons vu que la nouvelle méthode appelée GKAS prenait en compte un nombre significatif de propriétés fondamentales ainsi que des phénomènes résultant de la combustion et nous avons démontré la nécessité d'une définition précise de la vitesse de flamme laminaire pour n'importe quel rapport d'équivalence local.

Le troisième chapitre s'est intéressé à l'étude des flammes laminaires diphasiques. Avant même d'étudier la combustion au sein d'un milieu turbulent, il est apparu naturel d'effectuer l'analyse de flammes laminaires diphasiques afin de comprendre une partie des nouveaux phénomènes apparaissant du fait de la présence d'un combustible liquide. Nous sommes donc revenus sur la notion de richesse d'un mélange car si pour un combustible donné, le rapport d'équivalence à la stœchiométrie reste le même que ce combustible soit considéré sous forme gazeuse ou sous forme liquide, ce n'est plus le cas pour la notion de richesse. Ensuite, nous nous sommes concentrés sur l'un des facteurs primordiaux lors de la combustion d'un spray qui est la dynamique d'évaporation des gouttes. Nous avons montré que dans le cas de l'évaporation d'un spray de richesse liquide ϕ_L donnée, la richesse gazeuse finale dépendait fortement d'un nombre adimensionnel D_v correspondant au rapport entre le temps d'évaporation des gouttes et le temps caractéristique de chauffage de la goutte, ce qui pouvait modifier de façon radicale le comportement de la flamme. Enfin, la propagation d'une flamme au sein d'un nuage de gouttelettes a été abordée et la structure des flammes en fonction de la topologie du combustible liquide a été étudiée. Nous avons constaté que la flamme se propageait dans le domaine en pulsant et qu'elle avait une structure typique de flamme double : prémélange + diffusion.

Le quatrième chapitre contient une étude sur les flammes sprays turbulentes. Après une étude bibliographique concernant la classification de la morphologie des flammes sprays, nous avons réalisé des DNS d'un problème simplifié de jet spray brûlant dans un coflow d'air avec trois paramètres variables (rapport d'équivalence, temps d'évaporation et distance inter-gouttes). Des flammes laminaires ont tout d'abord été simulées et leurs structures détaillées. Nous avons vu qu'une structure de flamme triple classique se développait autour du spray si un mélange riche est impliqué et que pour des sprays pauvres ou stœchiométriques, une flamme prémélangée pauvre se propageait. Des simulations de jet turbulents ont été effectuées avec différents paramètres d'injection pour un spray monodispersé et les bases de données nous ont permis de décrire les régimes de flammes locale et globale apparaissant dans la combustion de sprays. Pour finir, un diagramme de combustion a été développé avec un nombre minimal de dimensions impliquant le temps d'évaporation des gouttes, l'espace moyen inter gouttes ou groupes de gouttes, et enfin le rapport d'équivalence injecté.

Il serait donc intéressant de réaliser d'autres simulations afin de compléter le diagramme précédent. En effet, celui-ci pourrait prendre en compte les variations possibles de la turbulence et des paramètres chimiques.

Annexe A

Méthodes numériques pour la génération de champs DNS avec des statistiques imposées : vitesse turbulente, scalaires fluctuants et sprays à densité variable

A.1 Introduction

De nos jours, la simulation numérique directe (DNS) et la simulation aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation) sont très largement utilisées pour l'analyse des phénomènes physiques intervenant dans les écoulements turbulents. Comparativement à la résolution des équations de Navier-Stokes moyennées selon Reynolds (RANS pour Reynolds Averaged Navier-Stokes) qui donne l'énergie cinétique moyenne de tout écoulement, les simulations numériques (NS pour numerical simulation) impliquent la résolution exacte soit de l'ensemble des structures turbulentes (DNS) ou des plus grandes structures (LES) tandis que les échelles plus petites et dissipatives sont modélisées. Au début, la DNS était dédiée aux écoulements simples comme les turbulences homogènes [65] ou les couches de mélanges [41]. Par la suite, des écoulements inertes plus complexes [30] ont été étudiés grâce à cet outil. Depuis, il y a environ une quinzaine d'années, les écoulements réactifs ont été introduits [53] et plus récemment, une extension aux écoulements à deux phases inertes ou réactifs a été effectuée [72, 59]. Suivant une évolution parallèle et depuis le développement de modèles dynamiques en 1991 [27], les études LES ont été adoptées dans la communauté CFD pour résoudre les écoulements complexes inertes

ou réactifs. La DNS et la LES ont beaucoup de points communs. En tout premier lieu, elles résolvent les équations instantanées, les statistiques étant effectuées à posteriori. Des méthodes numériques précises et non-dissipatives sont nécessaires et peuvent conduire à des calculs coûteux. D'un autre côté, les deux principales difficultés de la simulation numérique sont les conditions limites et initiales (BC&I). En effet, la DNS et la LES sont des outils précis et pour décrire correctement un écoulement, des informations précises sont nécessaires. Ce n'est donc pas utile d'effectuer une NS si les conditions BC&I sont fausses ou trop rudes.

L'objectif de cette annexe est de présenter une méthode générique permettant la génération de n'importe quel champ ou écoulement turbulent. En partant de la méthode de Rogallo [65] pour générer un champ de vitesse turbulent d'après un spectre donné, la méthode a été étendue à la génération de champs scalaires turbulents avec des statistiques imposées (i.e. une fonction de densité de probabilité) et des échelles de longueur. Suivant la même procédure, la génération de sprays de gouttelettes avec une densité locale variable est également proposée. L'ensemble de ces procédures peut être utilisé pour l'initialisation d'une simulation d'un écoulement gazeux ou à deux phases. De plus, après une légère modification, ces mêmes procédures peuvent aussi bien être utilisées pour imposer des conditions limites variant dans le temps. La première partie de ce travail provient de la thèse de J. Réveillon [58]. La nouveauté que nous proposons concerne la partie spray qui n'avait pas été abordée jusqu'à présent.

Il existe essentiellement deux travaux sur l'initialisation de champ de simulation numérique. Rogallo [65] a été le premier à proposer une méthode numérique pour générer les trois composantes d'un champ de vitesse turbulent. Le spectre imposé fournit le niveau d'énergie cinétique turbulente de tous les modes de l'espace spectral. Ensuite, les phases sont déterminées aléatoirement pour générer un écoulement homogène. La méthode de Rogallo est détaillée dans cette annexe de sorte que n'importe quel lecteur intéressé puisse y trouver l'ensemble des méthodes.

Pour étudier la combustion et/ou le mélange dans un écoulement turbulent, il est très important d'être capable de contrôler la fraction massique des espèces ou le champ de température. En 1988, Eswaran et Pope [22] ont donc proposé une méthode pour générer des champs scalaires turbulents avec des statistiques bimodales (la fraction massique est égale à 0 ou 1). Cette annexe présente une méthode étendue permettant d'imposer toutes les statistiques scalaires et toutes les échelles de longueur.

Les liens entre la description théorique de l'énergie d'un écoulement turbulent et sa description numérique discrétisée dans un maillage Cartésien sont tout d'abord détaillés. Ensuite, la méthode de Rogallo est présentée, suivie de l'ensemble des procédures pour générer un champ scalaire. Enfin, la méthode est étendue à la génération de champ de sprays Lagrangien polydispersés avec une densité locale contrôlée et une fonction de distribution du diamètre.

A.2 Champ de vitesse turbulent

Dans cette section, nous commençons par la définition basique de l'énergie spectrale $E(k)$ pour estimer l'énergie contenue dans chaque cellule divisant l'espace spectral. $E(k)$ est un paramètre donné et il peut être obtenu d'après une expression analytique ou des résultats expérimentaux. Deux formes analytiques pour $E(k)$ sont présentées dans ce papier.

A.2.1 Répartition de l'énergie dans l'espace spectral

Commençons tout d'abord par quelques définitions. Le spectre d'énergie $E(k)$ exprime, dans l'espace spectral (ou l'espace de fréquence) $\mathcal{S}$, la quantité d'énergie cinétique dans le mode k , où k est le nombre d'onde. $\mathcal{S}$ a le même nombre de dimensions $\mathcal{D} = 3$ que l'espace physique $\mathcal{P}$. Le transfert de valeurs entre $\mathcal{S}$ et $\mathcal{P}$ est fait par une transformée de Fourier discrète [57], et les valeurs de $\mathcal{P}$ sont réelles alors que celles de $\mathcal{S}$ sont complexes. Une géométrie cartésienne est utilisée et $L_{i=1,\mathcal{D}}$ est la taille du domaine physique dans la direction i . $L_{i=1,\mathcal{D}}$ est divisée en $N_{i=1,\mathcal{D}}$ noeuds identiques, la largeur de chaque cellule étant définie par $\Delta x_{i=1,\mathcal{D}} = L_{i=1,\mathcal{D}}/N_{i=1,\mathcal{D}}$. Dans l'espace spectral $\mathcal{S}$, les longueurs élémentaires $\Delta k_{i=1,\mathcal{D}}$ sont définies selon chaque direction i par $\Delta k_{i=1,\mathcal{D}} = 2\pi/L_{i=1,\mathcal{D}}$.

On peut introduire le tenseur spectral $\phi_{ij} = \hat{u}_i \hat{u}_j^*$ comme l'équivalent spectral des corrélations de fluctuations de vitesses $u_{i=1,\mathcal{D}}$. $\hat{u}$ est la transformée de Fourier de u . Par définition,

$$E(k) = \frac{1}{2} \int_{\Theta_k} \phi_{ii} d\Theta_k \quad ,$$

où Θ_k est la surface de la sphère de rayon k et $d\Theta_k = 4\pi k^2 dk$, en coordonnées sphériques ($d\Theta_k = 2\pi k dk$ pour un signal 2D).

La densité spectrale $E(k)$ représente [45] l'énergie des fluctuations contenues dans le volume $V_S[k, k + dk]$ délimitée dans les sphères de rayon k et $k + dk$ (Fig. PA.1.a), avec $dk \rightarrow 0$. Pour décrire ces fluctuations, le module et la phase doivent être déterminés (valeur complexe). Une génération parfaite d'un champ turbulent impliquerait la connaissance à la fois de l'intensité (module) et de la phase des fluctuations des sphères considérées. Mais cette information n'est pas connue. Par conséquent, le problème est simplifié grâce aux deux hypothèses suivantes :

1. Générer une turbulence homogène isotrope implique qu'il n'y a pas d'angle privilégié pour la vitesse spectrale. Celle-ci est obtenue par une détermination aléatoire des phases.
2. Le module de la vitesse spectrale, et donc celui de l'énergie, est pris constant dans une sphère donnée pour éviter toute hypothèse hasardeuse concernant les fluctuations de l'énergie.

Ainsi, avec ces hypothèses, le champ spectral de la vitesse dépend seulement du rayon k et est déterminé directement d'après $E(k)$.

A.2.2 Discrétisation de l'espace spectral

La discrétisation de l'espace spectral se fait en deux étapes : premièrement, toujours sous un système de coordonnées sphériques, nous passons d'une description continue dépendant de l'élément dk à une description discrète avec une largeur donnée Δk . Ensuite, l'énergie est allouée à chaque noeud cartésien.

La description continue impliquant de connaître la distribution de l'énergie sur les surfaces sphériques de rayon k n'est plus utile. En effet, la discrétisation de la courbe de densité spectrale implique de connaître l'énergie contenue dans le volume délimité par les deux sphères Θ_k et $\Theta_{k+\Delta k}$ (fig. PA.1.a), les rayons étant k et $k + \Delta k$. L'énergie contenue dans le volume sphérique $V_S[k, k + \Delta k] = \Theta_{k+\Delta k} - \Theta_k$ peut s'écrire :

$$E_{k,k+\Delta k} = \frac{1}{2} \int_{\Theta_k}^{\Theta_{k+\Delta k}} \phi_{ii} d\Theta_k \quad ,$$

et elle est liée à la densité spectrale $E(k)$ par la relation :

$$E_{k,k+\Delta k} = E(k) \Delta k \quad .$$

Par hypothèse, ϕ_{ii} est constant à l'intérieur du volume $V_S[k, k + \Delta k]$, ainsi :

$$E_{k,k+\Delta k} = 2\pi k^2 \phi_{ii}(k) \Delta k \quad , \quad (\text{A.1})$$

est la relation qui relie l'énergie $E_{k,k+\Delta k}$ et les fluctuations de vitesse spectrale $\hat{u}_i$.

La seconde étape consiste à transférer une description sphérique vers un maillage Cartésien pour l'espace spectral. Pour conserver l'énergie, les valeurs appliquées à chaque noeud Cartésien de l'espace spectral doit représenter toute l'énergie contenue dans le volume concerné $\Delta V_k = \Pi_{i=1}^{\mathcal{D}} \Delta k_i$.

Tout point de l'espace spectral avec les coordonnées Cartésienne suivantes (k_1, k_2, k_3) appartient au volume $V_S[k, k + \Delta k]$ avec $k \leq \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2} < k + \Delta k$. La relation entre le module de la vitesse spectrale appliquée à ce point et $\phi_{ii}(k)$ s'écrit :

$$\|\hat{\vec{u}}(k_1, k_2, k_3)\|^2 = \phi_{ii}(k) \Delta V_k \quad , \quad \text{où } k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}.$$

Cette expression implique, pour tout point de l'espace spectral, une relation entre le module de la vitesse et la densité d'énergie imposée $E(k)$:

$$\|\hat{\vec{u}}(k_1, k_2, k_3)\|^2 = \frac{E(k)}{2\pi k^2} \Delta V_k \quad , \quad \text{où } k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}. \quad (\text{A.2})$$

En ce point, le module de la vitesse est connu. Pour tout point dans l'espace spectral, les angles liés à l'orientation des vecteurs turbulents sont choisis aléatoirement entre 0 et 2π pour éviter toute direction privilégiée. En dehors du fait qu'on obtient une turbulence homogène, cela offre la possibilité de générer divers champs turbulents pour un même spectre initial $E(k)$ en modifiant les séries aléatoires.

A.2.3 Orientation des vecteurs vitesses

Le module du vecteur $\hat{\vec{u}}(k)$ étant connu, sa direction doit être définie. Pour satisfaire la condition d'incompressibilité, sa direction est choisie aléatoirement dans le plan normal au vecteur d'onde $\vec{k}$. Prenons $(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$ comme vecteurs de référence de ce plan. $\hat{\vec{u}}(k)$ s'écrit donc :

$$\hat{\vec{u}}(k) = \Gamma(k) \vec{p}_1 + \Lambda(k) \vec{p}_2 \quad ,$$

où Γ et Λ sont deux coordonnées complexes à déterminer. L'équation A.2 impose une condition sur le module de ces deux composantes :

$$|\widehat{u}(k)|^2 = \Gamma(k)^2 + \Lambda(k)^2 = \frac{E(k)}{2\pi k^2} \Delta V_k \quad .$$

Ainsi, Γ et Λ s'écrivent :

$$\Gamma = \left(\frac{E(k)}{2\pi k^2} \Delta V_k \right)^{(1/2)} \exp(i\alpha_1) \cos(\alpha_3) \quad , \quad \Lambda = \left(\frac{E(k)}{2\pi k^2} \Delta V_k \right)^{(1/2)} \exp(i\alpha_2) \sin(\alpha_3) \quad .$$

Les trois angles α_1 , α_2 et α_3 sont choisis aléatoirement dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. Finalement, la base $(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$ peut être déterminée par les relations suivantes :

$$\vec{p}_1 = \frac{1}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} (\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2, 0) \quad , \quad \vec{p}_2 = \frac{\vec{k} \wedge \vec{p}_1}{k} \quad .$$

Rogallo [65] exprime les composantes du champ de vitesse spectrale d'après le module et les phases α_1 , α_2 et α_3 de la façon suivante :

$$\widehat{u}_1 = \left(\frac{\Gamma k k_2 + \Lambda k_1 k_3}{k \sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \right) \quad , \quad \widehat{u}_2 = \left(\frac{-\Gamma k k_1 + \Lambda k_2 k_3}{k \sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \right) \quad , \quad \widehat{u}_3 = \left(-\frac{\Lambda \sqrt{(k_1^2 + k_2^2)}}{k} \right) \quad ,$$

avec $\Gamma = \|\widehat{u}(k_1, k_2, k_3)\| e^{i\alpha_1} \cos(\alpha_3)$, $\Lambda = \|\widehat{u}(k_1, k_2, k_3)\| e^{i\alpha_2} \sin(\alpha_3)$ et, comme d'habitude, $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$.

Pour effectuer des simulations numériques d'écoulements turbulents compressibles, les conditions initiales des paramètres thermodynamiques doivent être reliées, sinon le comportement de tout l'écoulement serait affecté par les ondes de pression numériques. En particulier, il semble nécessaire d'introduire les fluctuations de pression correspondantes aux structures turbulentes générées. Cela peut être fait facilement grâce à l'équation de Poisson exprimée dans l'espace spectral pour les fluctuations de pression :

$$\widehat{p}' = -\rho \frac{k_i k_j}{k} \widehat{u_i u_j} \quad .$$

De nombreuses approches sont possibles pour initialiser le champ de densité. Tout d'abord, l'écoulement peut être considéré incompressible avec une densité uniforme ρ . Ensuite, le champ de température peut être déduit de la loi d'état des gaz. Une autre approche, proposée par Ristorcelli et Blaisdell [64], est de considérer l'évolution isentropique de l'écoulement. Dans ce cas, les fluctuations de densité sont liées aux fluctuations de pression.

A.2.4 Retour sur l'espace physique

A ce niveau, le signal de la turbulence a été généré dans l'espace spectral tri-dimensionnel $\mathcal{S}$. Le nombre de noeuds dans chaque direction doit être au moins égal à $N_i/2$ pour permettre une description efficace de toutes les structures décrites par le spectre d'énergie.

Les transformées de Fourier inverses sont utilisées pour obtenir le signal de l'espace physique. La procédure suivante doit être suivie pour obtenir les valeurs réelles dans l'espace $\mathcal{P}$:

1. Calcul des valeurs de l'espace spectral dans le demi espace ($k_1 \geq 0$) comme décrit ci-dessus (valeurs complexes).
2. Transformée de Fourier inverse dans le demi domaine ($k_1 \geq 0$) selon la direction k_3 (valeurs complexes).
3. Transformée de Fourier inverse dans le demi domaine ($k_1 \geq 0$) selon la direction k_2 (valeurs complexes).
4. Initialisation du demi domaine ($k_1 < 0$) tel que $\hat{u}(k_1) = \hat{u}^*(-k_1)$. Ensuite, une transformée de Fourier inverse est réalisée selon la direction k_1 . Les phases dans le plan $k_1 = 0$ doivent être égales à 0 pour générer un signal réel dans l'espace physique.

En faisant cela, le champ généré respecte toutes les caractéristiques physiques spécifiées dans le spectre donné. La planche PA.2. montre un exemple 2D de champs turbulents générés d'après un spectre de Passot-Pouquet et d'autres d'après un spectre de Pope. Le premier crée seulement de grandes structures à cause de sa forme caractéristique simple alors que les petites structures sont développées avec le second. Ces champs ont été générés dans un espace 2D pour des raisons graphiques. En effet, pour générer un signal 2D, seule une modification de l'expression pour le volume élémentaire $d\Theta_k$ est nécessaire, l'ensemble de la méthodologie restant la même.

A.3 Génération de champs scalaires turbulents

Le principe de la génération de champ scalaire turbulent avec fonction de densité de probabilité imposée est de diffuser spatialement les valeurs statistiques d'une PDF donnée : $P^y(Y)$ associé au champ scalaire limité $Y(\vec{x})$, sur un champ spatial illimité $Z(\vec{x})$ qui a été initialisé

d'après un spectre imposé $E_z(k)$. Une procédure à quatre étapes (fig. PA.1.b) est proposée :

1. Tout d'abord, un champ scalaire turbulent illimité $Z(\vec{x})$ est généré grâce au spectre donné $E_z(k)$.
2. Dans une table sont écrites les positions des noeuds telles que les valeurs de $Z(\vec{x})$ soient dans un ordre croissant numérique. Parce que le domaine est discrétisé, les N positions sont ordonnées de sorte qu'elles correspondent aux N noeuds du maillage.
3. Au même moment, un ensemble de N valeurs est généré en respectant la PDF donnée : $P^y(Y)$. De la même façon, ces valeurs sont ordonnées numériquement.
4. Pour finir, le champ $Z(\vec{x})$ est substitué par la valeur Y de sorte que le champ Y soit distribué suivant les positions ordonnées du champ Z .

Les détails de cette procédure à quatre étapes vont être présentés. L'initialisation du champ $Z(\vec{x})$ est semblable à la génération d'une composante du champ de vitesse. En supposant une répartition isotropique du scalaire énergie, la relation suivante peut être écrite :

$$\widehat{Z}\widehat{Z}^* = \frac{E_z(k)}{2\pi k^2} \Delta V_k \quad ,$$

où V est le volume physique du domaine de calcul. Ainsi, le champ $\widehat{Z}(\vec{k})$ est construit par les relations suivantes :

$$\widehat{Z} = \sqrt{\frac{E_z(k)}{2\pi k^2} \Delta V_k} \exp(i\theta) \quad ,$$

où θ est une phase aléatoire choisie dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. Le champ $Z(\vec{x})$ de l'espace physique est obtenu d'après $\widehat{Z}(\vec{k})$ grâce à une transformée de Fourier inverse comme décrit précédemment pour le vecteur vitesse. $Z(\vec{x})$ n'est pas limité mais suit exactement le spectre d'énergie donné.

Le domaine physique est discrétisé par un maillage dont le nombre total de noeuds est $N = \dot{\omega}_{i=1}^{\mathcal{D}} N_i$ et avec $N_{i=1, \mathcal{D}}$ noeuds dans chaque direction i . Ces noeuds sont pointés par l'indice général k . Cependant, si i_1 , i_2 et i_3 correspondent à la position d'un noeud dans un maillage 3D, k peut être définie par $k = i_1 + (i_2 - 1)N_1 + (i_3 - 1)N_1N_2$. Dans un tableau K de N éléments sont rangés les index k tels que :

$$Z(K(l)) \leq Z(K(l+1)) \quad ,$$

pour tout l de l'intervalle $[1, N - 1]$.

L'étape suivante est la génération d'une série ordonnée $Y(l)$ de N éléments ($Y(l) < Y(l + 1)$). La PDF de $Y(l)$ est celle imposée $P^y(Y)$. La nouvelle valeur Y remplace la valeur non limitée bien que les structures générales fluctuantes restent les mêmes. Le "mapping" se fait de la façon suivante :

$$Z(K(l)) = Y(l) \text{ pour } l = 1 \text{ à } N \quad .$$

Selon ce processus, le champ Z est "rempli" de sa plus petite à sa plus grande valeur par le champ Y .

Le champ Y est généré à partir de la PDF donnée $P^y(Y)$. Par définition, $P^y(Y)$ est telle que $\int_{Y_{min}}^{Y_{max}} P^y(Y) dY = 1$. Si $P^y(Y)$ est une fonction continue, elle doit être discrétisée en N_Y telle que $Y_i = Y_{min} + \Delta_Y * (i - 1/2)$ avec $\Delta_Y = (Y_{max} - Y_{min})/N_Y$ grâce à la relation suivante :

$$P_i^y = \frac{1}{\Delta_Y} \int_{y_i - \Delta/2}^{y_i + \Delta/2} P^p(y) dy \quad . \quad (A.3)$$

La PDF discrétisée (P_i^y ; $i = 1, N_Y$) est multipliée par N , le nombre total de valeurs, pour extraire $N_i^y = \mathcal{R}(N * P_i^y * \Delta_Y)$ qui représente le nombre de noeuds dans le champ prenant la valeur Y_i . Parce que les valeurs N_i^y doivent être des entiers, elles sont arrondies avec des valeurs de plafond ou de plancher par l'opérateur $\mathcal{R}$ tel que $\sum_{i=1, N_Y} N_i^y = N$. La série ordonnée est alors obtenue directement par l'algorithme suivant :

```

l = 0           nombre de cellules
for i = 1 to  $N_Y$    tous les scalaires
    for k = 1 to  $N_i^y$  le nombre de cellules correspondant au iieme scalaire
        l = l + 1   incrémentation de la cellule
         $Y(l) = Y_i$   valeur d'initialisation
    endfor
endfor

```

A ce moment, le champ scalaire turbulent a été généré. Les valeurs statistiques de ce champ sont celles imposées. Durant le processus, de nouvelles valeurs scalaires ont été appliquées pour contrôler la PDF, ainsi le niveau général de l'énergie du champ obtenu est différent de celui du spectre imposé mais les longueurs caractéristiques et les positions des structures turbulentes restent les mêmes. Quelques exemples de génération de scalaires sont présentés planches PA.3.,

PA.4. et PA.5.a. Dans le premier cas (panche PA.3.), un champ avec une forte ségrégation (PDF bimodale) a été appliqué sur un spectre d'énergie à un mode et également sur un spectre bimodal. Bien entendu, un spectre continu classique peut être utilisé mais notre exemple a été choisi pour souligner la capacité de la méthode à contrôler toutes les échelles de longueurs caractéristiques. Dans le second exemple (panche PA.4.), un spectre à un mode a été utilisé mais deux statistiques différentes ont été appliquées : une PDF Gaussienne (variance faible) centrée autour de la valeur moyenne 0.5 et une PDF bimodale (avec la même valeur moyenne 0.5 mais avec une forte variance, proche de son maximum 0.25). La génération de toute forme de PDF peut se faire selon plusieurs méthodes. La procédure fonction-beta est présentée en annexe de ce papier. Elle permet la génération d'une PDF à partir du premier et du second moment de toute valeur fluctuante. Pour des champs à forte ségrégation, il faut faire attention à ce que les niveaux de gradient de scalaire ne soient pas plus élevés que les capacités des méthodes numériques (intégration en temps, différence spatiale) qui ont été appliquées sur le champ. Pour ces mêmes raisons, la discrétisation de la PDF doit être assez fine pour éviter de grandes variations entre les valeurs successives prises par le scalaire. Le dernier exemple (panche PA.5.a), montre la propagation d'une flamme prémélangée dans un environnement turbulent.

A.4 Description d'un spray Lagrangien dispersé

Ces méthodes peuvent être étendues à l'initialisation de nombreux champs. L'étude de la dispersion de spray dans un écoulement turbulent est un autre exemple de la capacité des simulations numériques pour l'analyse des phénomènes physiques [60, 20]. La distribution initiale du spray est très importante, et encore une fois, la méthode de génération spectrale peut être utilisée. En effet, le spray initial doit être décrit suivant deux valeurs statistiques différentes : la fonction de distribution du diamètre (ou de la masse) et la PDF de la densité locale de gouttes. Dans le premier cas, une PDF expérimentale ou analytique (log-normal, Rosin-Rammler, . . .) [17] peut être utilisée pour déterminer la distribution de taille des gouttes. Mais la seconde PDF doit concerner la distribution de la densité de gouttes dans le champ continu. Soit $P^a(a)$ la PDF imposée de la taille de gouttes ou de particules et $P^n(n)$ la PDF de la densité locale de gouttes

$n(\vec{x})$ dans le domaine. La méthode suivante permet de générer un champ spray turbulent :

1. Premièrement, la PDF $P^n(n)$ est utilisée comme champ statistique imposé pour générer le champ scalaire turbulent $\xi(l)$ avec un spectre décrivant les échelles de longueurs des poches de gouttes. Ainsi, la valeur de ξ en chaque noeud $l = 1, N$ du domaine représente la densité de gouttes dans le volume de contrôle du noeud considéré.
2. Le nombre de gouttes affectées à un noeud est déterminé grâce à la relation suivante :

$$\eta(l) = \frac{V}{\Pi_i(N_i - 1)} \xi(l) \quad \text{avec } l = 1, N \quad .$$

Le volume du domaine de calcul a été discrétisé par un maillage isotropique.

3. Par conséquent, le nombre total de gouttes dans le domaine est défini par l'entier $N_d = \sum_{l=1,N} \eta(l)$. Les valeurs statistiques de ces gouttes sont imposées à travers la PDF $P^a(a)$ de leurs diamètres. De même si la PDF analytique a été imposée, elle doit être discrétisée en N_a pas :

$$P_i^a = \frac{1}{\Delta_a} \int_{a_i - \Delta_a/2}^{a_i + \Delta_a/2} P^a(a') da' \quad ,$$

où $\Delta_a = a_{max}/N_a$ est la largeur du pas de discrétisation. Finalement, $N_i^a = \mathcal{R}(N_d * P_i^a * \Delta_a)$ est le nombre de gouttes dans le domaine dont le diamètre est a_i . $\mathcal{R}$ est également le paramètre approximatif tel que $\sum_{i=1,N_a} N_i^a = N_d$.

4. La dernière étape de cette procédure concerne la répartition des N_d gouttes dans le domaine par rapport à la densité locale désirée. Pour cela, tous les groupes de cellules ayant la même densité locale sont pris en compte. Le nombre adéquate de gouttes correspondant à ce groupe est alors aléatoirement dispersé entre les cellules. Une fois que les gouttes ont été affectées à une cellule, leur position à l'intérieur de la cellule est déterminée aléatoirement. Leur taille est sélectionnée parmi les diamètres $\sum_{i=1,N_a} N_i^a$ de gouttes pour satisfaire la PDF imposée $P^a(a)$ qui peut suivre, par exemple, une distribution log-normale. La sélection du diamètre peut être aléatoire (dans les limites de $P^a(a)$) ou elle peut suivre n'importe quelle procédure logique.

Après l'application de cette procédure, la position et le diamètre de chaque goutte sont initialisés. La fonction de distribution de diamètre du spray a été imposée ainsi que la densité locale de gouttes. Les propriétés de la phase continue (vitesse, température, ...) peuvent être interpolées sur les gouttes pour finaliser l'initialisation du spray.

A.5 Appendice - Nomenclature

$\mathcal{D}$	Nombre de dimensions du problème
$E(k)$	Spectre d'énergie imposé (ou densité spectrale)
$\vec{k}$	Vecteur dans l'espace spectral (nombre d'onde)
k	Norme de $\vec{k}$
k_i	Coordonnée du nombre d'onde selon la direction i
$\mathcal{P}$	Espace physique
$L_{i=1,\mathcal{D}}$	Longueur du domaine physique dans la direction i
$N_{i=1,\mathcal{D}}$	Nombre de noeuds de discrétisation du domaine physique
$\mathcal{S}$	Espace de Fourier ou spectral
p	Pression
$\vec{p}_1, \vec{p}_2$	Structure de référence dans le plan normal à tout vecteur d'onde $\vec{k}$
$P^y(Y), P^a(a), P^n(n)$	PDFs imposée
$\vec{u}$	Vecteur vitesse dans l'espace physique
$\widehat{\vec{u}}$	Vecteur vitesse dans l'espace spectral
V_S	Volume entre deux sphères two spheres
$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$	Phases aléatoires dans l'espace spectral
$\Delta k_{i=1,\mathcal{D}}$	Largeur des cellules dans le domaine spectral
$\Delta x_{i=1,\mathcal{D}}$	Largeur des cellules dans le domaine physique
ΔV_k	Volume d'une cellule dans le domaine spectral
Γ, Λ	Coordonnées dans la structure $(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$
Φ_{ij}	Tenseur spectral
ρ	Densité du fluide
Θ_k	Surface de la sphère de rayon k dans l'espace spectral

A.6 Appendice - Spectre d'énergie analytique

La génération de champ d'écoulement turbulent implique de connaître le spectre d'énergie cinétique. Dans cette appendice, deux formes analytiques usuelles sont proposées. Cependant, avec la procédure présentée dans ce papier, aucune autre forme ne peut être utilisée.

A.6.1 Spectre de Passot-Pouquet

Cette expression très simple est généralement utilisée :

$$E(k) = A \left(\frac{k}{k_0} \right)^4 \exp \left(-2 \frac{k^2}{k_0^2} \right) \quad , \quad (\text{A.4})$$

où le nombre d'onde k_0 correspond à la position du maximum du spectre. Le paramètre A est déterminé comme une fonction de l'énergie cinétique imposée grâce à la relation suivante :

$$k_c = \int_0^\infty E(k) dk \quad .$$

A peut donc s'écrire comme une fonction de k_c

$$A = \frac{32}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k_c}{k_0} \quad ,$$

ou, comme une fonction de la vitesse moyenne au carré (u^2) :

$$\begin{cases} A = \frac{32}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{u^2}{k_0} & (2D) \\ A = 16 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{u^2}{k_0} & (3D) \end{cases} .$$

Quelques propriétés basiques de la turbulence générée peuvent être obtenues d'après la définition du spectre (eq. A.4). Par exemple, la dissipation de l'énergie est définie par :

$$\varepsilon = 2\nu \int_0^\infty E(k) k^2 dk = \frac{5}{2} \nu k_c k_0^2$$

et l'échelle intégrale peut être obtenue au travers de :

$$\begin{cases} L_p = \frac{2}{k_c} \int_0^\infty \frac{E(k)}{k} dk = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k_0} & (2D) \\ L_p = \frac{3\pi}{4k_c} \int_0^\infty \frac{E(k)}{k} dk = \sqrt{2\pi} \frac{1}{k_0} & (3D) \end{cases}$$

A.6.2 Spectre de Pope

La forme analytique proposée par Pope [56, 49] est plus complexe. Cependant, elle permet une gamme d'inertie assez large et donc, une meilleure description des petites structures dissipatives. Le spectre est obtenu grâce à la relation suivante :

$$E(k) = C (2\pi)^{-5/3} (\nu^5 \varepsilon)^{1/4} \left(\frac{k}{k_\eta} \right)^{-5/3} f_l \left(\frac{k}{k_l} \right) f_\eta \left(\frac{k}{k_\eta} \right)$$

avec

$$\begin{cases} k_\eta = 2\pi \left(\frac{\varepsilon}{\nu^3} \right)^{1/4} \\ k_l = 2\pi \frac{\varepsilon}{u^3} \end{cases}$$

les nombres d'onde correspondant aux plus petites (Kolmogorov) et aux plus grandes (intégrale) échelles. Les deux fonctions f_l et f_η sont sans dimension. Elles sont données par :

$$\begin{cases} f_l = \left\{ \frac{k^2}{k^2 + c_l k_l^2} \right\}^{\frac{p_0+5/3}{2}} \\ f_\eta = \exp \left\{ -2\pi \beta \left(\left[\frac{k^4}{k_\eta^4} + c_\eta^4 \right]^{1/4} - c_\eta \right) \right\} \end{cases}$$

La fonction f_l (resp. f_η) détermine la forme du spectre pour l'aire de la production d'énergie (resp. pour la dissipation d'énergie). Les paramètres du modèle sont les suivants :

$$\begin{cases} p_0 = 4 \\ C = 1.5 \\ \beta = 5.2 \end{cases}$$

Les dernières valeurs c_l et c_η sont des constantes positives déterminées pour jouer sur les propriétés suivantes :

$$\begin{cases} k_c = \int_0^\infty E(k) dk \\ \varepsilon = 2\nu \int_0^\infty k^2 E(k) dk \end{cases}$$

Trois spectres différents définis par la relation de Pope sont représentés sur la planche PA.5.b.

A.7 Appendice - Construction de la PDF analytique

Plusieurs outils numériques sont valables pour générer des formes de PDF à partir de valeurs statistiques. Parmi ceux-ci, l'utilisation des fonctions PDF- β qui ont besoin uniquement des deux premiers moments des statistiques est très courante. Soient $\tilde{z}$ et $\widetilde{z''^2}$ la moyenne et la

variance de z . Pour générer une PDF par rapport à ces deux moments, la relation suivante peut être utilisée :

$$\tilde{P}(z) = \frac{z^{\alpha-1} (1-z)^{\beta-1}}{\int_0^1 z^{\alpha-1} (1-z)^{\beta-1} dz} = z^{\alpha-1} (1-z)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} ,$$

où Γ est la fonction d'Euler et les paramètres α et β sont reliés à $\tilde{z}$ et $\widetilde{z''^2}$ par les équations :

$$\alpha = \left(\frac{\tilde{z} (1 - \tilde{z})}{\widetilde{z''^2}} - 1 \right) \tilde{z} ,$$

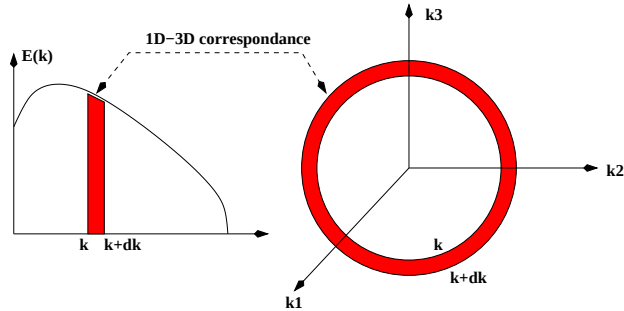
$$\beta = \left(\frac{\tilde{z} (1 - \tilde{z})}{\widetilde{z''^2}} - 1 \right) (1 - \tilde{z}) .$$

L'utilisation de fonctions incomplètes $\Gamma_i(t)$ [57] définies par :

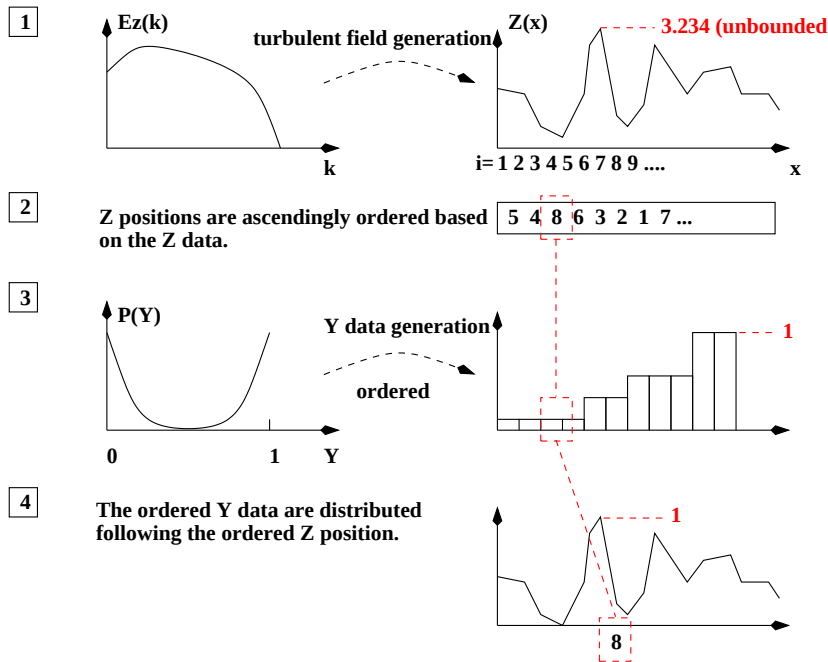
$$\Gamma_i(t) = \int_0^t P(z) dz$$

permet une discrétisation directe de la PDF :

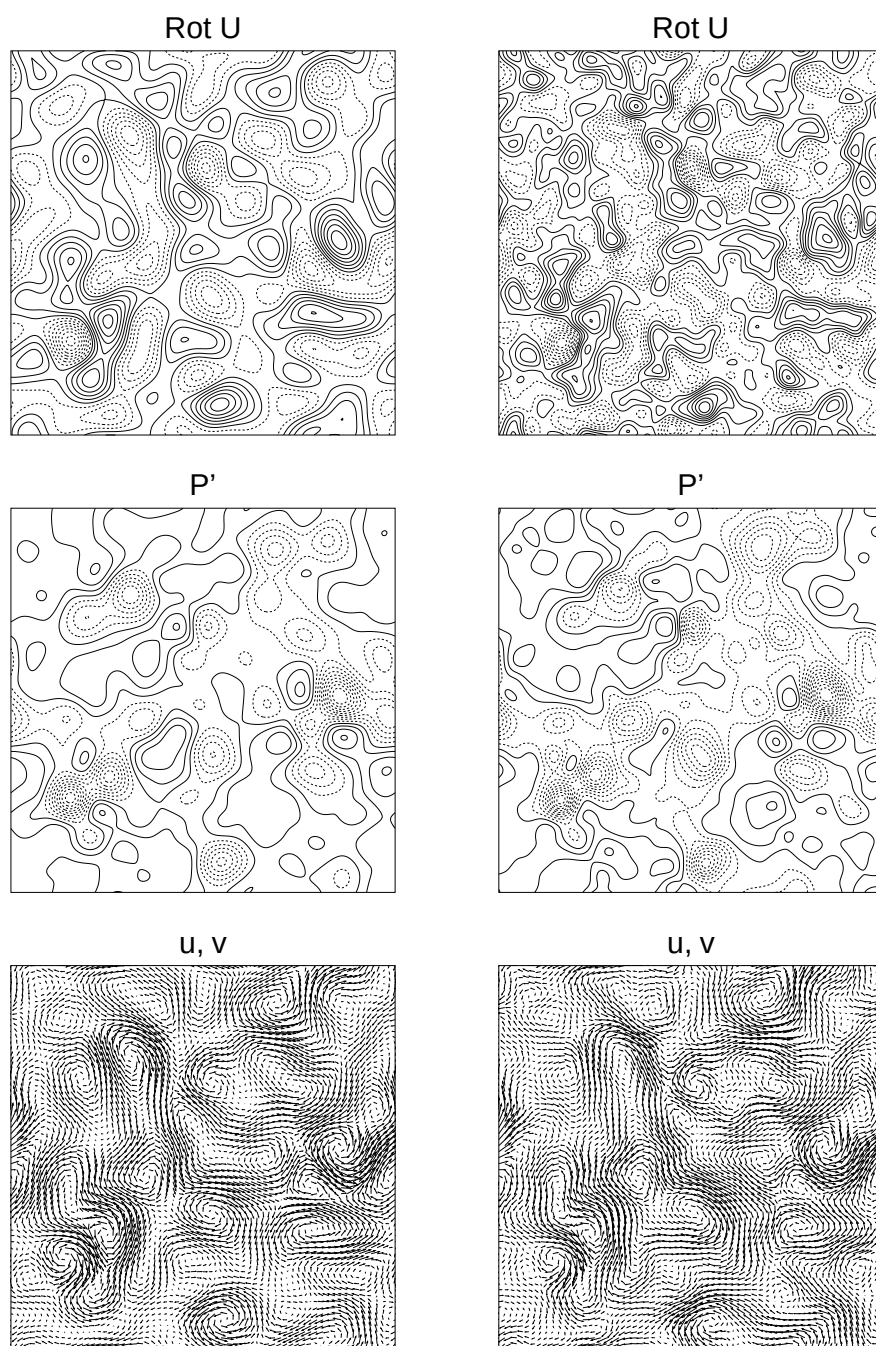
$$P_{(z, z+\Delta z)} = \Gamma_i(z + \Delta z) - \Gamma_i(z) .$$



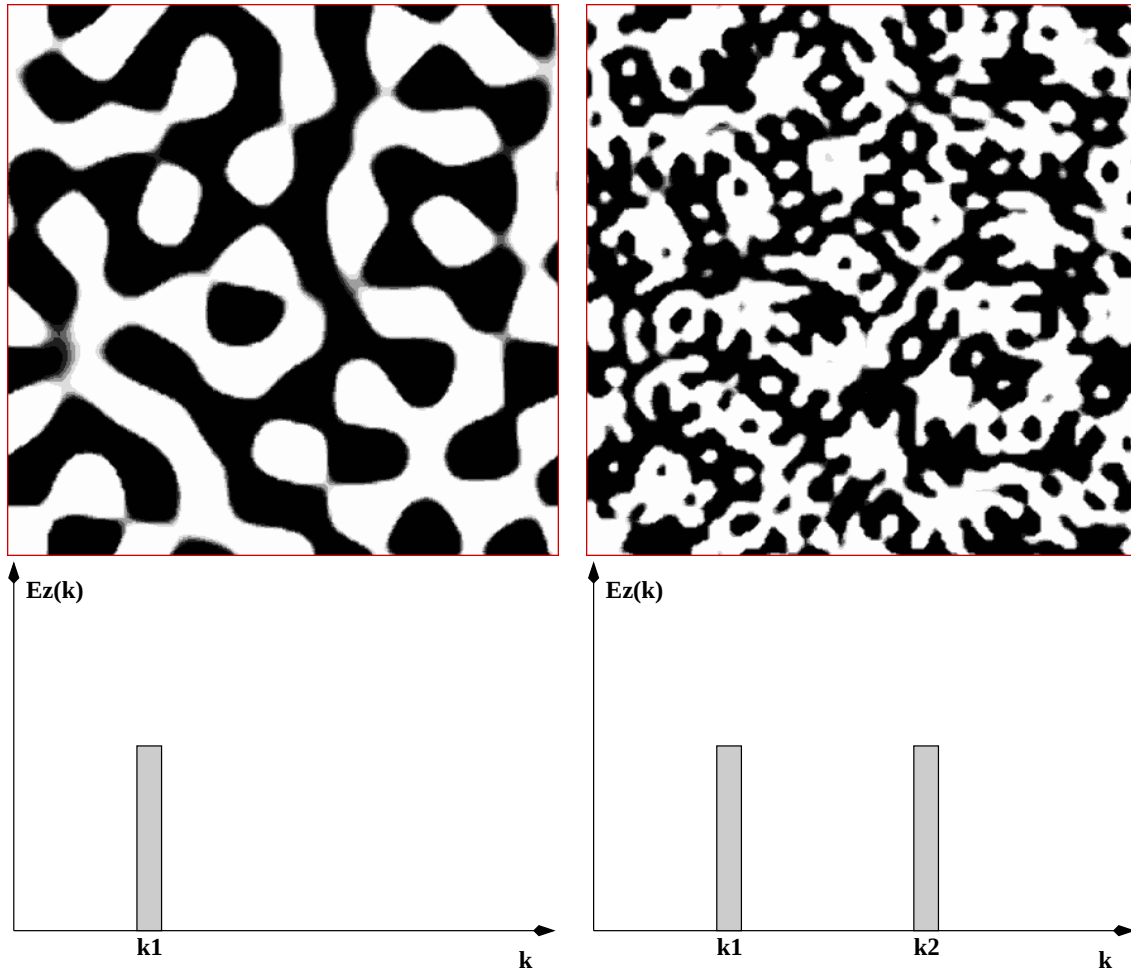
PA.1.a - Scénario de la correspondance entre le spectre d'énergie 1D et l'espace spectral 3D.



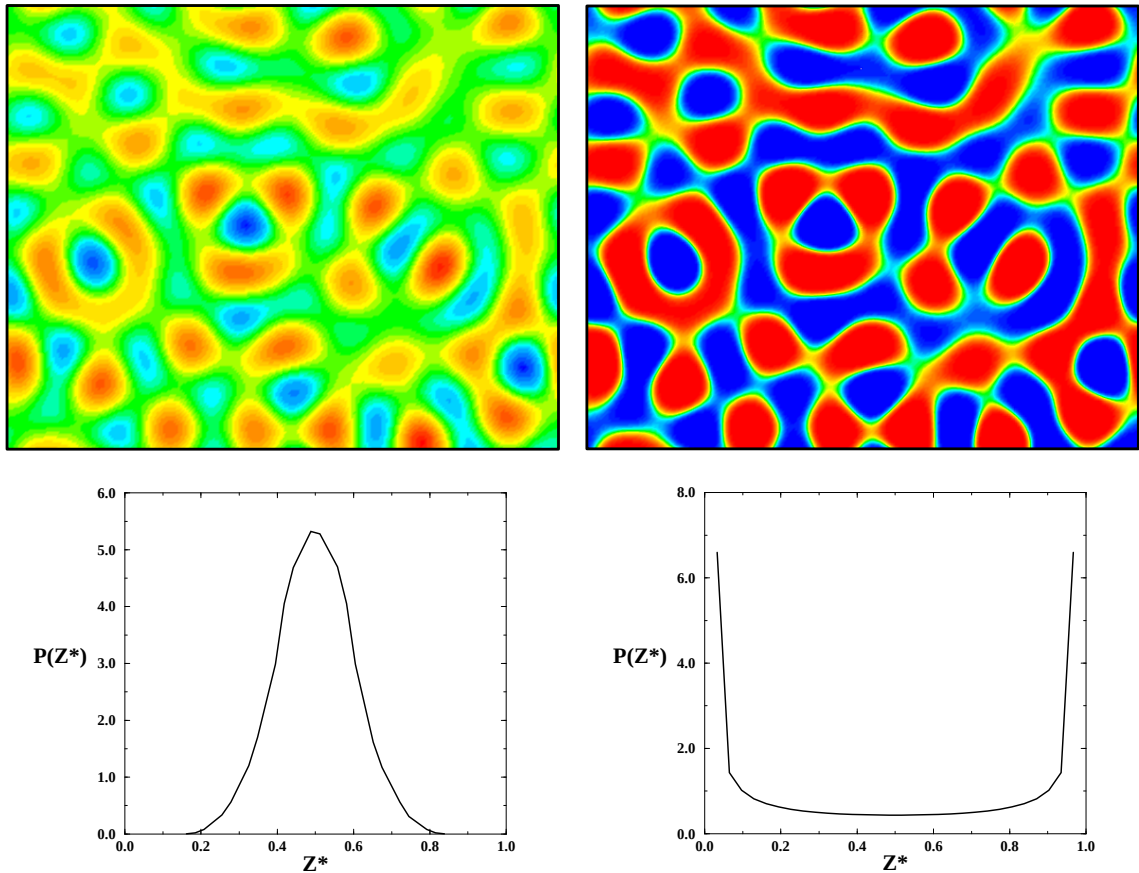
PA.1.b - Présentation d'une procédure à quatre étapes pour générer un champ scalaire turbulent avec un spectre imposé et une PDF.



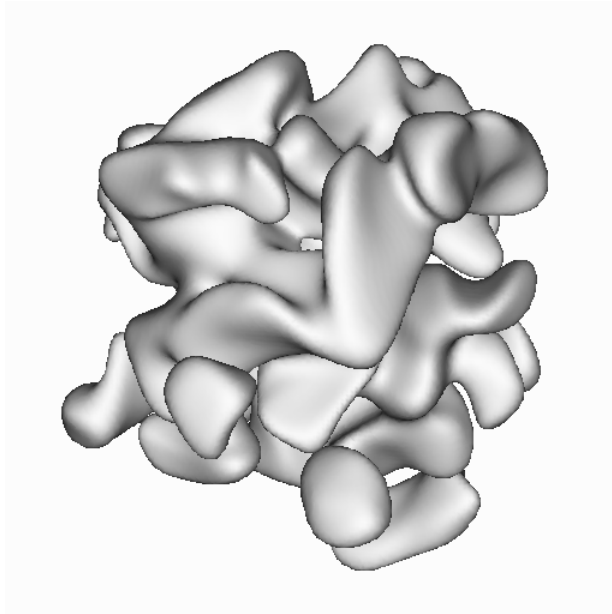
PA.2. - Champs de vitesse 2D (en haut : vorticit , au centre : fluctuations de pression, en bas : vecteurs vitesse) g n r s avec un spectre analytique (  gauche : Passot-Pouquet et   droite : Pope). La m me s rie al atoire a  t  utilis e pour les deux champs.



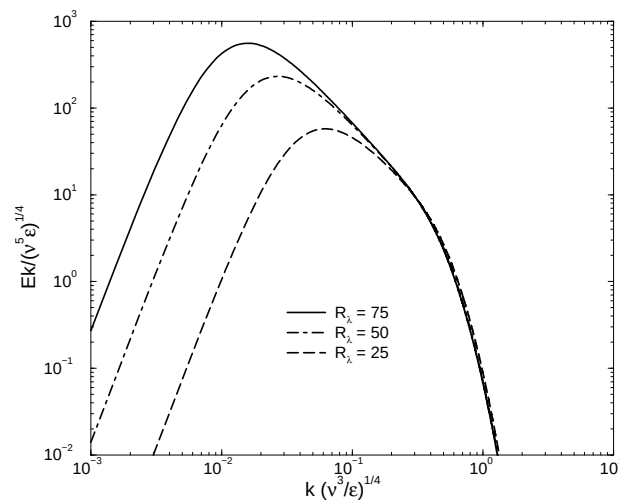
PA.3. - Génération de scalaire : exemple de contrôle des échelles de longueurs fluctuantes pour un scalaire à forte ségrégation. A gauche : spectre à un mode, à droite : spectre à deux modes.



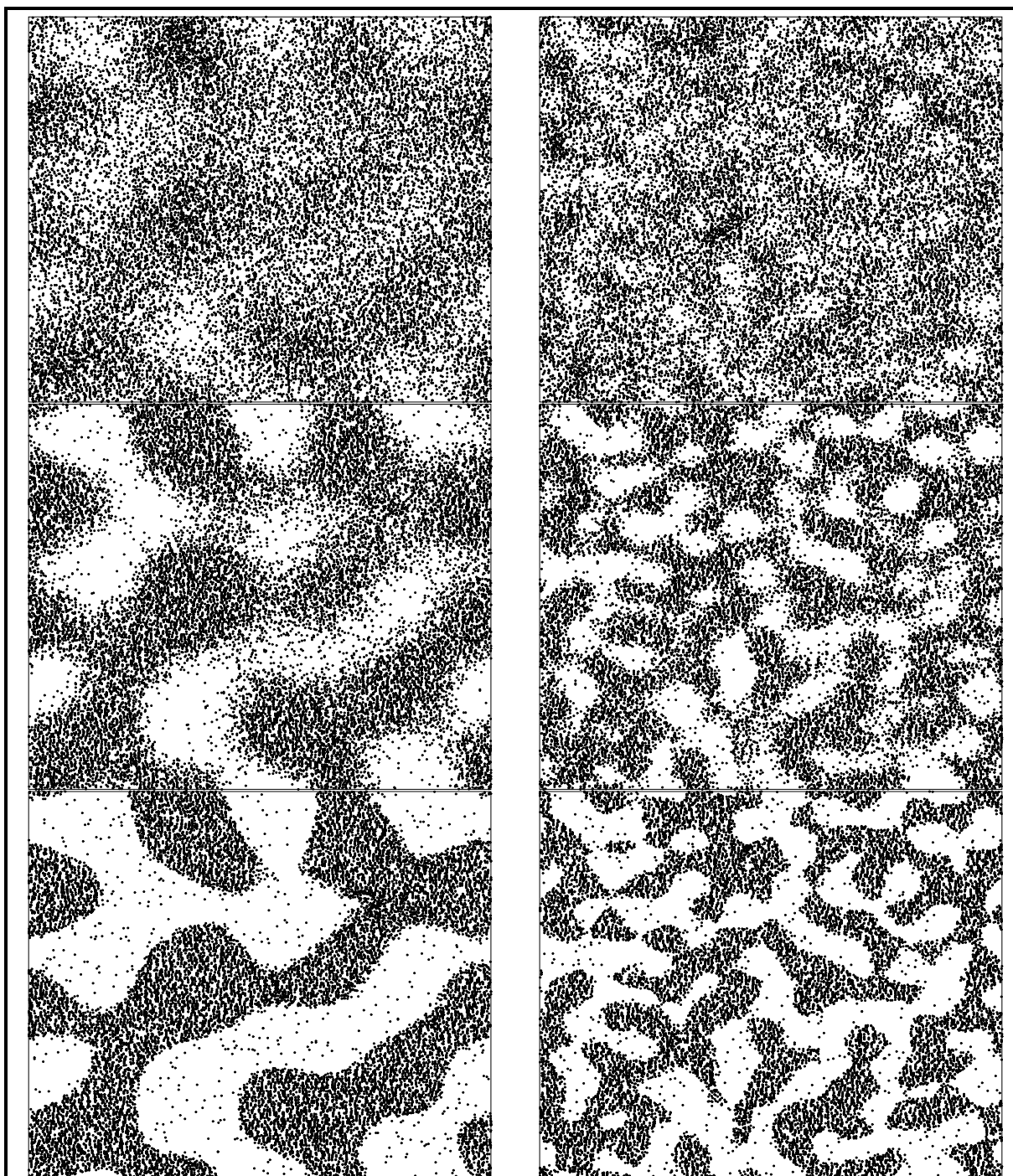
PA.4. - Génération de scalaires : exemple de contrôle de la PDF. A gauche : PDF Gaussienne, à droite : PDF bimodale (écoulement ségrégué).



PA.5.a - Surface de flamme se propageant, issue de la génération de la fraction massique de combustible turbulente.



PA.5.b - Représentation de plusieurs spectres de Pope pour l'énergie cinétique turbulente $\left(R_\lambda = \sqrt{15} \frac{u'^4}{\nu \epsilon}\right)$.



PA.6. - Génération de spray Lagrangien : exemple de contrôle à la fois de la PDF de densité des gouttes et des structures des poches. A gauche : structures à un mode, à droite : structures à trois modes, de haut en bas : la ségrégation de la densité des gouttes augmente.

Annexe B

Visualisation de l'effet de particules dispersées sur le transfert de chaleur d'un jet impactant

Ces travaux ont fait l'objet d'un article, paru dans *Journal of Flow Visualization and Image Processing* et retraduit dans son intégralité. Les références sont les suivantes : *Visualization of the effect of dispersed particles on heat transfer from an impinging jet*, J. Réveillon and K. Cannevière, Volume 9, page 11-24, 2002.

B.1 Résumé

L'objectif de ce travail est de montrer l'effet d'une phase dispersée solide (ou qui ne s'évapore pas) sur les structures turbulentes d'un jet impactant. La simulation numérique directe (DNS pour direct numerical simulation) a été utilisée pour décrire complètement l'évolution de la turbulence depuis la destabilisation du jet jusqu'à la disparition des structures. Un solveur Lagrangien a été couplé à un code de DNS pour décrire précisément les interactions entre les particules et le gaz. Deux types de particules ont été considérés : (1) Des particules incidentes qui sont insérées dans le jet au niveau de l'injecteur. Ces particules modifient fortement les caractéristiques de la turbulence et augmentent le transfert de chaleur à partir du jet. (2) Lorsque les particules incidentes impactent sur le mur, de très petits ejecta (particules de carbone) peuvent être émis et dans ce cas les flux de chaleur diminuent à cause d'un fort mélange turbulent près du mur. La création de petites structures tourbillonnaires ainsi que le noyau du

recyclage près du mur ont pu être détectés grâce à une visualisation numérique des écoulements instationnaires.

B.2 Introduction

Les écoulements turbulents impactants sont souvent rencontrés dans les systèmes aéronautiques et industriels (inverseurs de poussée, chambres de combustion, échangeurs de chaleur, . . .). Dans quelques cas, des particules solides ou des gouttes liquides sont insérées dans l'écoulement gazeux et peuvent fortement modifier les propriétés de la turbulence. Dans ce cas, les modèles existants dédiés aux interactions mur/écoulement peuvent être inefficaces pour les écoulements à deux phases parce qu'ils ont été développés dans le cadre des écoulements purement gazeux.

L'objectif de ce travail est de proposer une étude préliminaire sur l'effet de la phase dispersée sur le développement des structures turbulentes et sur l'impaction d'un jet impactant. Pour cela, des simulations numériques directes (DNS) sont réalisées avec un solveur Lagrangien pour la description de la phase dispersée. Les équations de Navier-Stokes pleinement compressibles sont résolues avec des schémas numériques d'ordre élevé. Par conséquent, tout l'écoulement turbulent est résolu de l'échelle de Kolmogorov à l'échelle de longueur intégrale. Le mouvement et l'impact des tourbillons peuvent donc être étudiés ainsi que la dispersion des particules.

De nombreux travaux sont dédiés à deux sujets très proches de la configuration étudiée, qui sont les jets impactants gazeux [77, 26, 37, 38] et la dispersion des particules dans des écoulements turbulents [78, 31]. Cependant, à cause de nombreuses difficultés numériques et expérimentales, très peu de travaux ont été reliés aux jets impactants à deux phases. Kaftori *et al* [33] ont travaillé sur la modification des échanges de chaleur entre un mur et un jet chargé de particules solides.

Dans cette étude, un jet impactant purement gazeux est utilisé comme écoulement de référence et deux simulations avec une phase dispersée ont été effectuées. La première avec de nombreuses particules dispersées dans l'écoulement principal et une seconde avec en plus des ejecta (petites particules de carbone) émis de la paroi pour imiter l'aéro-érosion.

La section suivante est consacrée à la description de la géométrie du problème. La méthode

numérique est alors décrite avec le mode d'impaction des particules. Ensuite, une étude qualitative de l'effet des particules sur les structures turbulentes est réalisée.

B.3 Configurations de calcul

Une configuration de jet turbulent impactant a été choisie de sorte que les phénomènes physiques basiques qui nous intéressent puissent être étudiés. En effet, cette configuration Cartésienne nous permet de décrire les interactions turbulence/particules/mur de manière simple. Ainsi, une première vue des effets de la dispersion de particules dans un jet turbulent impactant est proposée.

La figure B.1 montre un schéma de la configuration. Un faible coflow est injecté avec l'écoulement, avec une amplitude qui suit des oscillations anti-symétriques sinusoïdales. La période des oscillations est basée sur le nombre de Strouhal qui a été pris à 0.4 selon la fréquence de destabilisation optimale du jet. Cette méthode permet de générer rapidement des structures turbulentes afin que l'écoulement soit pleinement turbulent quand il atteint le mur (Fig. B.1).

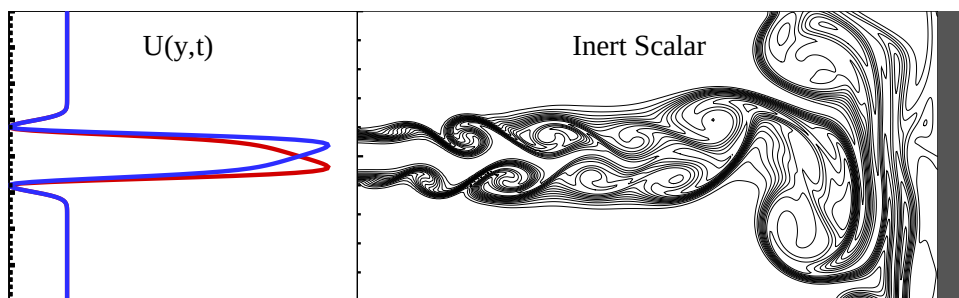
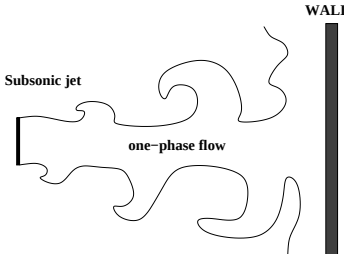
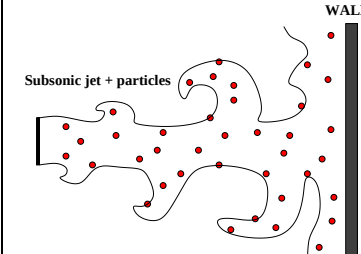
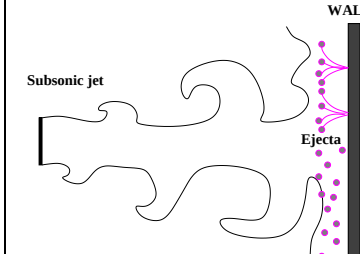


FIG. B.1 – Profil d'entrée fluctuant de la vitesse et scalaire inerte. A gauche : profil d'entrée de la vitesse, composante longitudinale $U(y, t)$. A droite : jet turbulent impactant, scalaire inerte.

Toutes les simulations ont été effectuées avec exactement les mêmes champs initiaux et des conditions limites similaires pour l'écoulement gazeux. Seuls les paramètres de la phase dispersée diffèrent dans les diverses simulations. Ainsi, les variations des résultats sont strictement dûes à la dispersion de la phase solide.

Sans compter le calcul de référence (DNS à une phase), deux configurations distinctes ont

Case B	Case I	Case E
		
Base simulation	Numerous incident particles	Few incident particles + ejecta
-	$E_r/E_i = 0.66$	$\Sigma E_e/E_i = 0.66$
-	$\Theta_i = 0.0033$	$\Theta_i = 0.0020$
-	-	$\Sigma M_e/M_i = 10$

TAB. B.1 – Paramètres des simulations. Le cas **B** est une simulation à une seule phase utilisée comme écoulement de référence. La simulation **I** correspond à de nombreuses particules incidentes avec une procédé simple d'impact (E_r est l'énergie cinétique de la particule après l'impact). Le cas **E** correspond à l'impact de quelques particules incidentes avec la méthode des éjecta. ΣM_e et ΣE_e sont la masse totale et l'énergie cinétique des éjecta émis après l'impact d'une particule incidente. La masse et l'énergie cinétique de cette particule sont M_i et E_i . Θ_e et Θ_i sont les diamètres correspondants.

été considérées (Tab. B.1). Tout d'abord, de nombreuses particules sont injectées avec le jet dans le domaine de calcul (cas I). Les particules sont dispersées par l'écoulement turbulent avant d'impacter sur le mur où une condition limite particulière de reflexion est appliquée (Fig. B.2). L'angle de réflexion r est égal et symétrique à l'angle d'incidence i et l'énergie cinétique de la particule avant (E_i) et après (E_r) l'impact diffère : $E_r = 0.66E_i$.

Dans la seconde simulation (cas *E*) quelques particules sont injectées avec le jet. Elles modifient à peine l'écoulement turbulent avant d'impacter sur le mur. Les éjecta proviennent alors de l'impact de particules sur le mur (Fig. B.2). Ces nouvelles particules sont plus petites mais nombreuses. Leur masse (M_e) et leur énergie cinétique (E_e) sont détaillées dans le tableau B.1. Les éjecta sont émis sans aucune direction privilégiée. Ainsi, l'angle entre la direction perpendiculaire au mur et la trajectoire de l'éjecta est déterminé aléatoirement dans l'intervalle suivant : $]-\pi/2, \pi/2[$. Quand un éjecta atteint de nouveau le mur, la même méthode d'impact est appliquée.

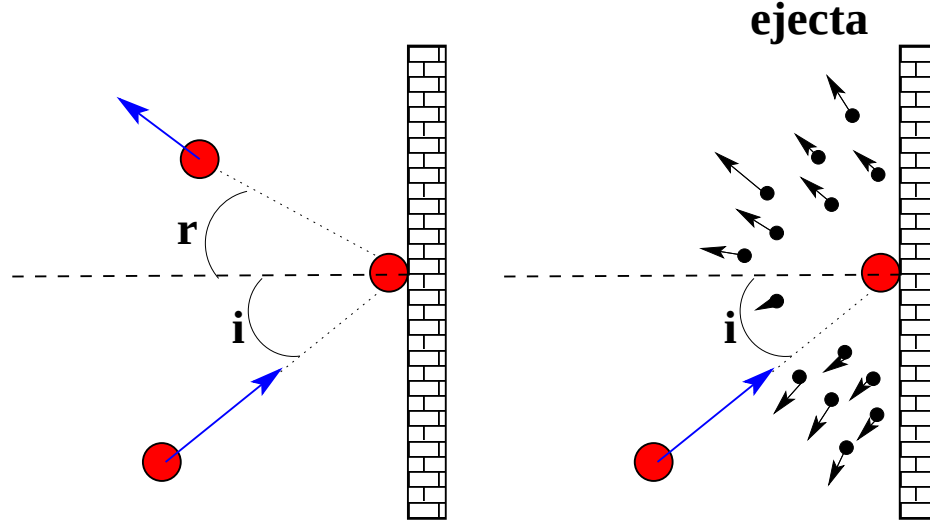


FIG. B.2 – Modes d'impact : (a) : réflexion simple ($r=i$) et (b) génération d'éjecta.

Tous les résultats présentés dans ce travail sont adimensionnés. Les paramètres de références sont les suivants : u_0 est la vitesse maximale du jet et t_0 est la période de perturbation du jet. Cette période a été choisie afin d'obtenir un nombre de Strouhal optimal de 0.4. $l_0 = u_0 * t_0$ est alors notre longueur de référence. Enfin, la largeur du jet est 0.4, la distance jet/mur est égale à 4 et la hauteur du domaine de calcul est égale à 2.

Le maillage ($321 * 192$ noeuds) est uniforme dans la direction transversale (y). Dans la direction longitudinale (x), la taille des mailles est fortement réduite près du mur pour prendre en compte la couche limite turbulente de l'écoulement.

B.4 Outils numériques

Du point de vue Lagrangien adopté pour la phase dispersée, les propriétés de chaque particule sont estimées en résolvant un système de deux équations pour la position X_i et la vitesse V_i :

$$\begin{aligned} \frac{dX_i}{dt} &= V_i \\ \frac{d(\theta)^3 V_i}{dt} &= AD_i \end{aligned}$$

avec la force de trainée donnée par la relation :

$$D_i = \rho \frac{\pi}{8} \theta^2 C_D |\underline{U} - \underline{V}| (U_i - V_i)$$

Dans l'équation ci-dessus, C_D est le coefficient de la force de trainée défini par :

$$C_D = \frac{24}{Re_D} \left(1 + \frac{Re_D^{2/3}}{6} \right)$$

où $Re_D = |\underline{U} - \underline{V}| \theta / \nu$ est le nombre de Reynolds de la particule et $A = 6 / (\pi \rho_p)$, est un paramètre constant dans lequel ρ_p est la densité constante de la phase solide. Les propriétés du gaz (viscosité $\mu = \rho \nu$, densité ρ et vitesse U_i) sont obtenues à la position de la goutte d'après les noeuds du maillage en utilisant un algorithme d'interpolation du troisième ordre.

L'écoulement est décrit dans un contexte Eulérien par les équations de conservation suivantes, décrivant l'évolution de la densité ρ , du moment ρU_i et de l'énergie ρE_t . La pression P et la température T sont liées par l'équation d'état des gaz parfaits, q_i est le flux de chaleur défini par $-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}$, et μ est la viscosité du fluide.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i U_i}{\partial x_i} &= -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{1}{V} \sum_k D_i \\ \frac{\partial \rho E_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho E_t U_i}{\partial x_i} + \frac{\partial P U_j}{\partial x_j} &= -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} U_j}{\partial x_i} - \frac{1}{V} \sum_k V_i D_i \end{aligned}$$

où

$$\frac{\partial(*)}{\partial t} + \frac{\partial(*)U_i}{\partial x_i} = \frac{\partial(*)}{\partial t} + \frac{\partial(*)U_j}{\partial x_j}$$

et

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$$

Pour réaliser le couplage entre les descriptions Eulérienne et Lagrangienne, les termes sources du moment et de l'énergie totale de chaque goutte sont cumulés dans un volume V défini dans le voisinage de noeud Eulérien.

Un schéma de type Runge-Kutta du troisième ordre avec une méthode de stockage de données minimale [80] est utilisé pour l'avancement en temps. Les dérivées spatiales sont estimées en utilisant un schéma de type PADE du sixième ordre [40]. Les conditions limites caractéristiques de Navier-Stokes ont été appliquées en suivant la méthode de Poinso et Lele [52].

B.5 Résultats et discussion

L'objectif principal de ce travail est d'étudier les effets de la dispersion de particules sur les structures turbulentes et le transfert de chaleur. Pour commencer, la simulation de référence (B) a été réalisée. Cet écoulement purement gazeux nous permet de quantifier le transfert de chaleur sans modification de la turbulence par une phase dispersée.

Ensuite, deux simulations, I et E, ont été effectuées. Dans le cadre de ce travail, seule une comparaison qualitative (avec ou sans éjecta) est effectuée. On montrera que les différences sont significatives.

B.5.1 Simulation de référence

La destabilisation du jet est due aux forts gradients de vitesse et à l'amplitude des oscillations anti-symétriques imposées. La figure B.1 montre la formation et l'évolution des structures turbulentes.

Les oscillations génèrent des structures turbulentes très rapidement et la destabilisation du jet a lieu à une très courte distance de l'injection (0.2, ce qui correspond à la moitié de la largeur d'injection). Le profil anti-symétrique a une répercussion sur la position des structures turbulentes qui frappent le mur alternativement (fig. B.1). Néanmoins, l'évolution des paramètres moyennés en temps est similaire autour de l'axe ($y = 1$) de l'injection. Ainsi, cette méthode nous permet de recueillir un échantillonnage statistique deux fois plus significatif que les oscillations symétriques nous auraient fournis. A cause du développement rapide des structures turbulentes, les tourbillons proches du mur sont pleinement développés. Par conséquent, des fluctuations significatives de la température sont présentes et elles affectent fortement les échanges de chaleur entre l'écoulement et le mur. La figure B.3 montre les détails de l'impact

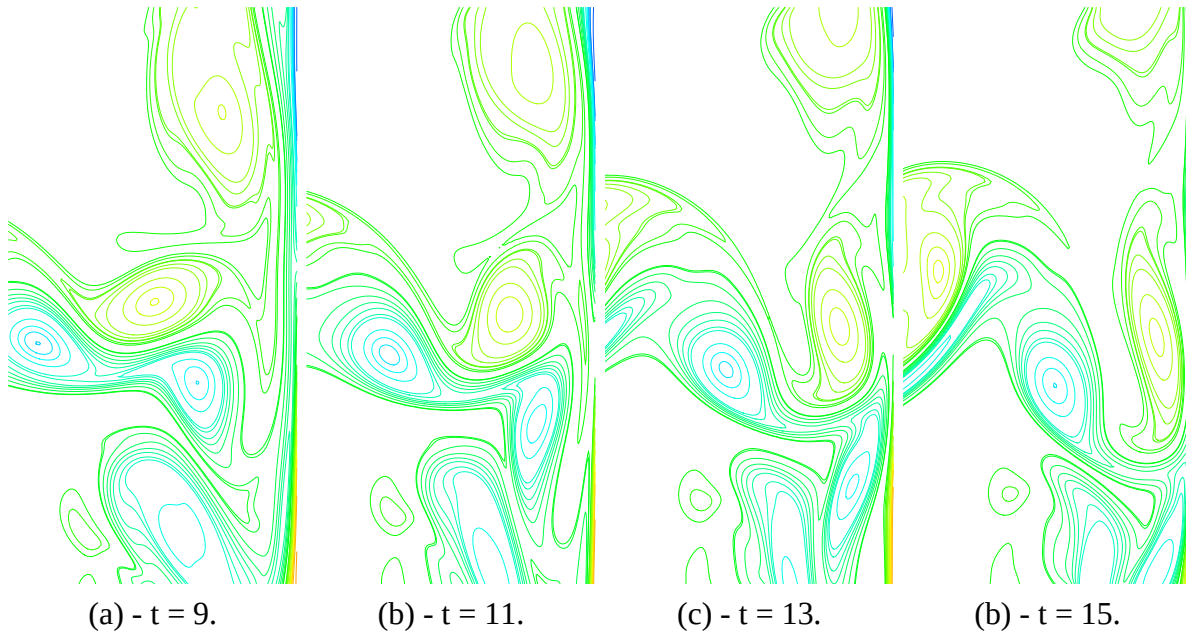


FIG. B.3 – Détails de l'impact d'un tourbillon.

d'une structure turbulente sur le mur. L'écrasement des tourbillons induit une forte variation des fluctuations de température qui, en moyenne, augmenteront.

B.5.2 Développement des structures

Les trois simulations (B,I, et E) commencent au même moment avec le même champ gazeux initial. De plus, les mêmes conditions limites dépendantes du temps sont utilisées pour les trois simulations. Les particules sont alors injectées avec l'écoulement et la turbulence est modifiée (cas I et E) à cause de leur force de trainée. Par conséquent, la génération des structures et le développement du jet sont modifiés seulement par la phase dispersée. La figure B.4 montre les champs de vorticit  au m me instant pour les trois simulations B,I, et E. La m me g n ration de structures peut  tre vue au d but du jet dans les cas B et E. En effet, puisque tr s peu de particules incidentes sont inject es, la turbulence est   peine modifi e par rapport au cas de r f rence B. Cependant, au niveau du mur, les ejecta ont un fort effet et le champ de vorticit  est profond ment modifi . Si les particules incidentes sont tr s nombreuses (simulation I), un effet significatif sur la dynamique de l' coulement est d tect . La force de train e de chaque

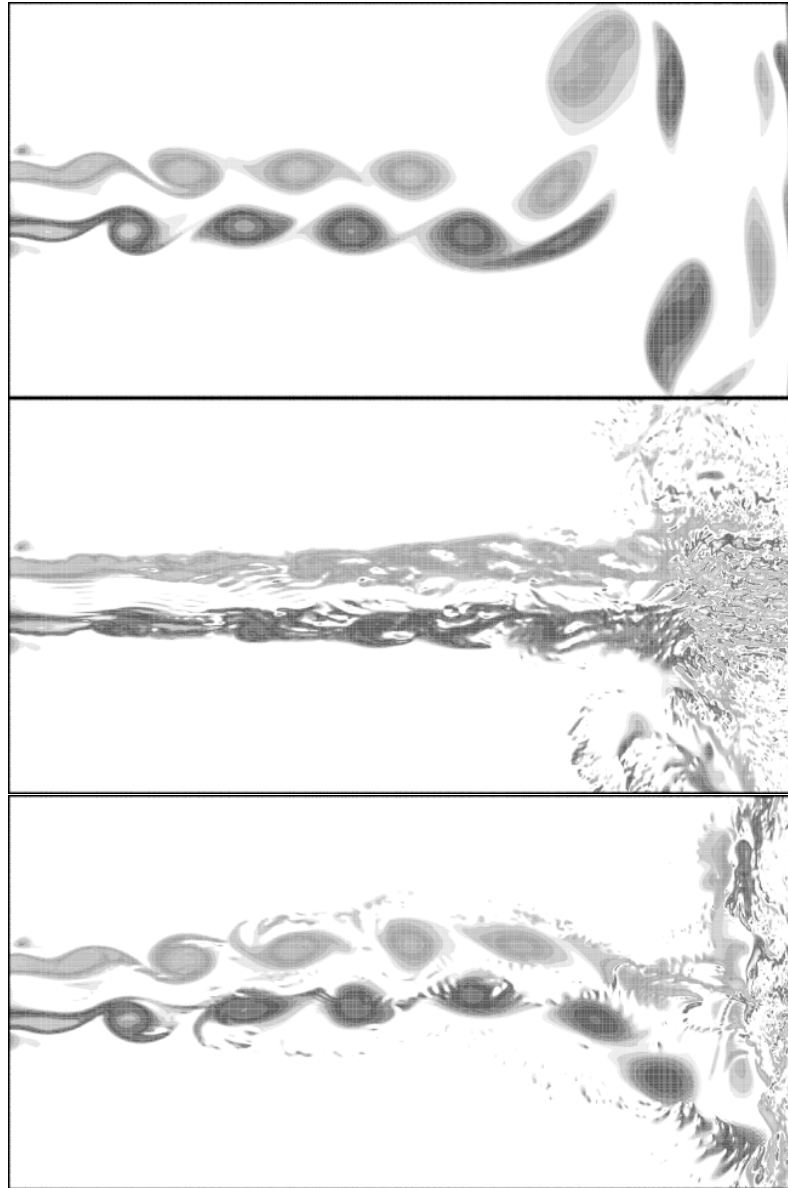
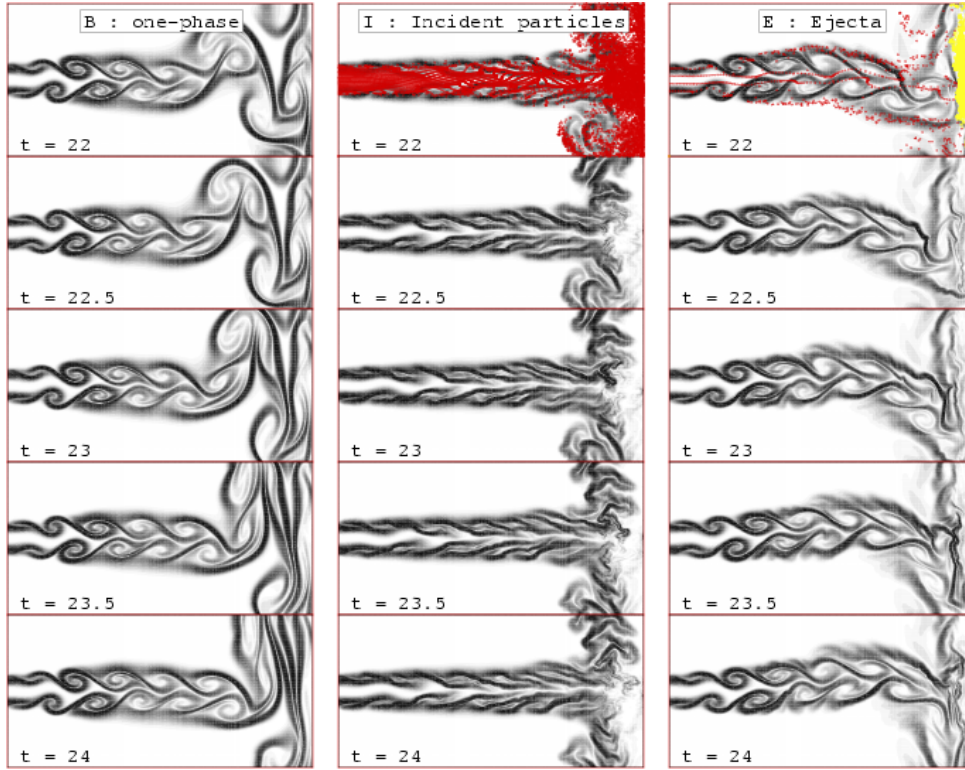


FIG. B.4 – Développement des structures (iso-niveau de vorticité) à $t = 23$. En haut : cas B, au centre : cas I et en bas : cas E.

FIG. B.5 – *Gradients de scalaires inertes.*

particule contribue à la génération de petites structures qui dissipent l'énergie cinétique turbulente dissipative et atténuent les grandes échelles du jet. De plus, le niveau de température va augmenter par rapport au cas B où l'énergie turbulente est contenue dans les grandes structures qui quittent le domaine de calcul. Des exemples de dispersion de gouttes peuvent être vus figure B.5 pour les cas I et E, avec la dissipation du scalaire inerte. Dans la même figure, plusieurs instants des trois simulations sont représentés. La destruction des structures est visible sur les structures du scalaire inerte et de grandes instabilités ont disparu.

B.5.3 Flux de chaleur

L'objectif principal de ce travail est d'étudier le transfert de chaleur moyen $\langle H_w(y) \rangle = \left\langle -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)_w \right\rangle$ au niveau du mur. La figure B.6 en haut montre $H_w(y, t)$ pour le cas B. Quand les structures turbulentes impactent sur le mur, les flux de chaleur sont fortement modifiés à

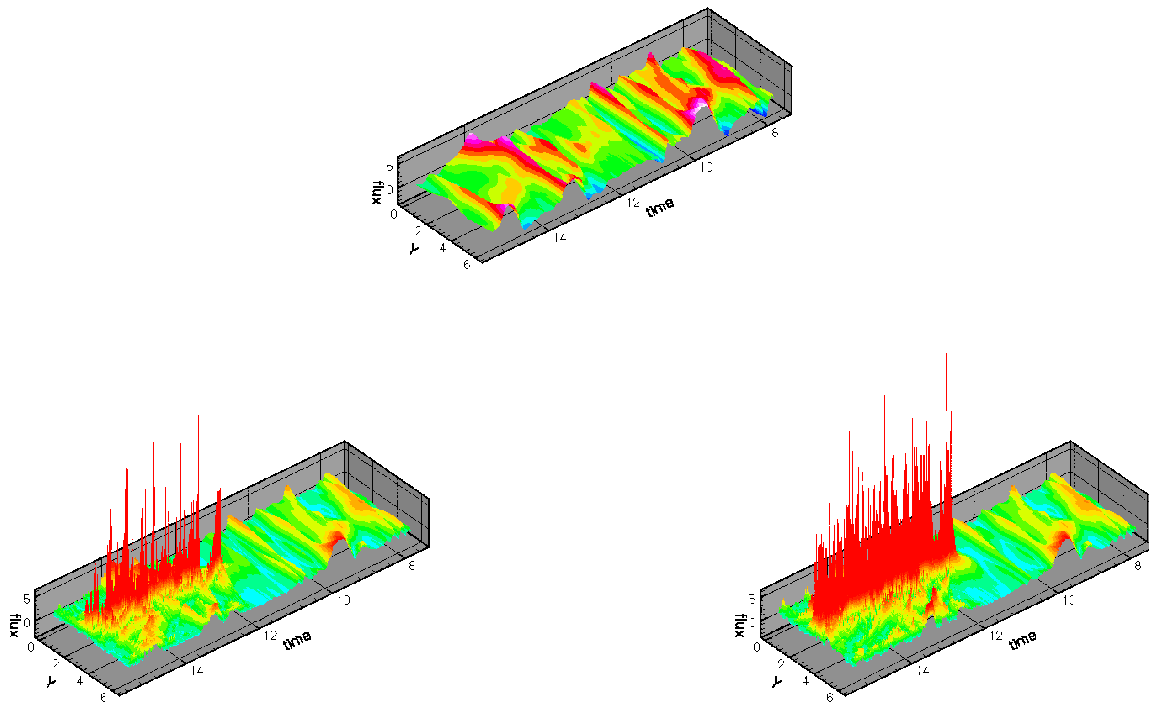


FIG. B.6 – *Flux de chaleur instantané au niveau du mur. En haut : cas B, à gauche : cas I, à droite : cas E.*

cause des variations de température résultant des forces visqueuses (fig. B.7). Il est possible de noter que les variations d'amplitude de ces flux sont d'environ de 5. Toutes les courbes de transfert de chaleur présentées dans ce travail ont été adimensionnées par la valeur maximale du transfert de chaleur moyen du cas B.

On peut observer l'effet d'une phase solide dispersée en injectant des particules de glace qui subiront une réflexion spéculaire ou causeront l'émission de l'ejecta en impactant le mur. Les particules traversent le domaine de calcul et modifient leur environnement avant d'atteindre le mur. La phase porteuse influencée par les forces de trainée atteint le mur autour de $t = 11$ comme le montre la figure B.6. Ensuite, les effets de la phase dispersée sur le transfert de chaleur sont clairement visibles puisqu'une augmentation significative des flux de chaleur est

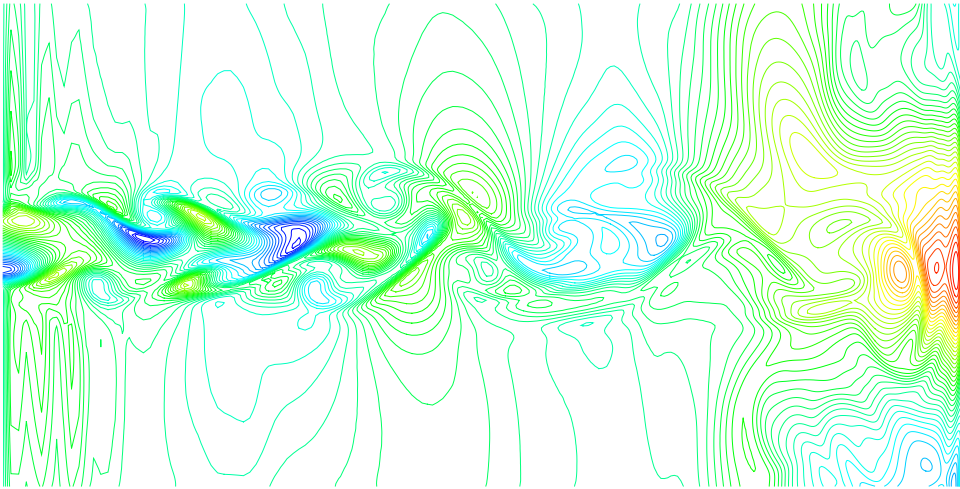


FIG. B.7 – *Champ de température, cas B, temps = 9.*

observée. Dans le cas I (fig. B.6-au centre), les pics de transfert de chaleur sont très denses. Ils sont dûs à la modification de l'écoulement loin en amont du mur. Dans le cas E (fig. B.6-en haut) les pics sont éparés et proviennent de la modification de la turbulence dans la couche limite. Ceci est confirmé par la figure B.8 qui montre au même instant le nombre d'éjecta au niveau du mur et la valeur absolue du maximum de transfert de chaleur. Il est à noter (fig. B.8), que pour chaque impaction de particule de glace, il y a une augmentation du nombre d'éjecta et, au même moment, une augmentation des transferts thermiques.

Le résultat principal de cette étude peut être vu figure B.9. Elle montre la moyenne temporelle du transfert de chaleur pour chacune des trois configurations : sans particule, avec des particules sans éjecta et finalement avec éjecta. Comme cela a déjà été démontré par Kaftori *et al* [33], un jet impactant dont la turbulence est fortement modifiée par la présence de particules augmente le transfert de chaleur bien plus significativement que dans le cas où il n'y a qu'une seule phase. Dans notre étude, les flux ont augmenté de plus de cent pour cent.

L'élément intéressant de cette figure (fig. B.9) est la forme du transfert de chaleur lorsque les éjecta sont émis. En effet, on peut remarquer une forte diminution du transfert de chaleur autour du point de stagnation. Dans ce cas, il y a très peu de particules de glace et elles modifient à peine l'écoulement en amont. Cependant, quand les éjecta sont envoyés à contre-courant avec une très forte énergie cinétique, une réduction importante du transfert de chaleur a lieu. Ce phénomène

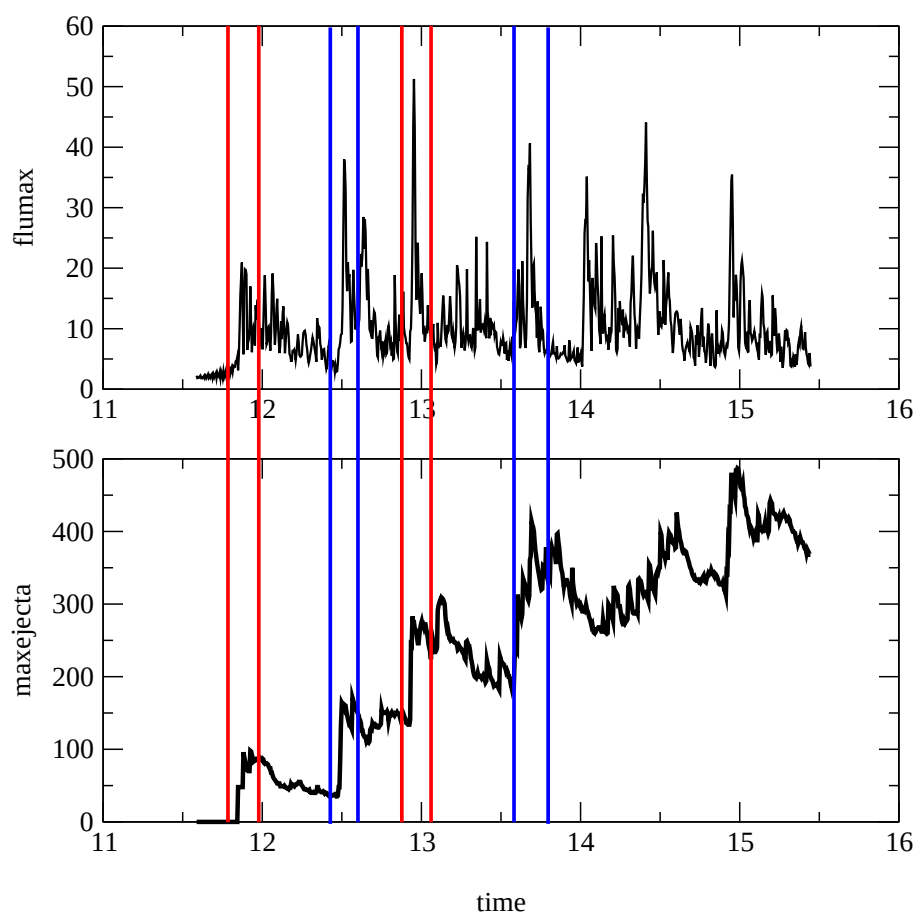


FIG. B.8 – Valeur maximale des flux de chaleur, cas E. Quand les éjecta sont émis, des pics de flux de chaleur apparaissent.

s'explique par le fait que la vitesse de glissement des particules (différentiel de vitesse entre les particules et l'écoulement) est vraiment significative quand elles quittent le mur. Cela génère, à travers la force de trainée, une forte augmentation de l'intensité de turbulence dans la zone où les gradients de température sont les plus importants. Le mélange turbulent diminue les gradients et donc les transferts de chaleur. La figure B.11 montre le profil de température dans la direction longitudinale. Les positions des coupes sont indiquées figure B.10. Le trait plein (fig. B.12) est le profil de température de référence (simulation B) le long de la ligne de stagnation. La ligne avec les symboles ronds est le profil moyen, à la même position de la température de la simulation E. On peut noter une élévation de la température alors que les gradients près du mur diminuent. Le

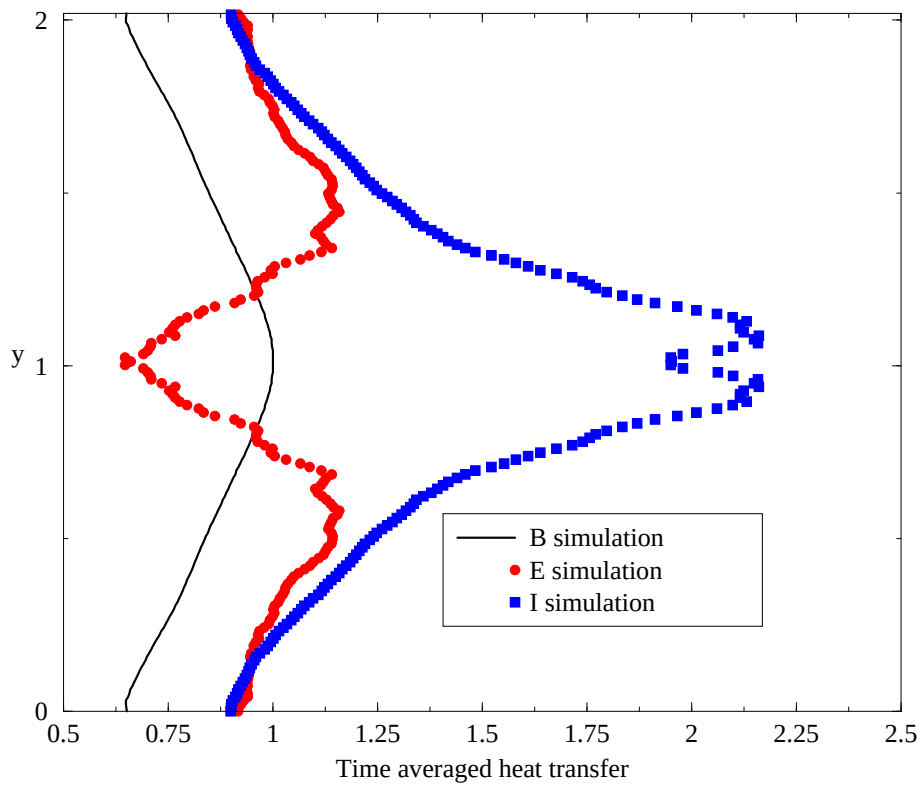


FIG. B.9 – Flux de chaleur moyennés entre l'écoulement turbulent et le mur.

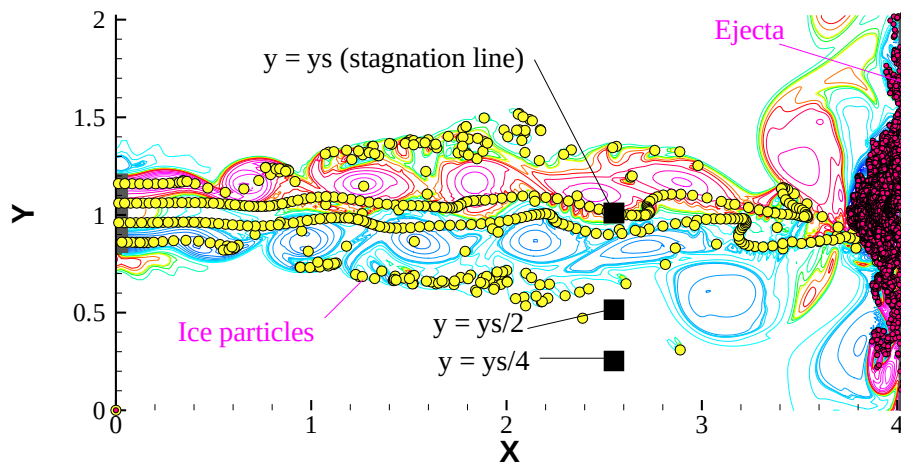


FIG. B.10 – Cas E, position des profils : y_s , $y_s/2$ et $y_s/4$.

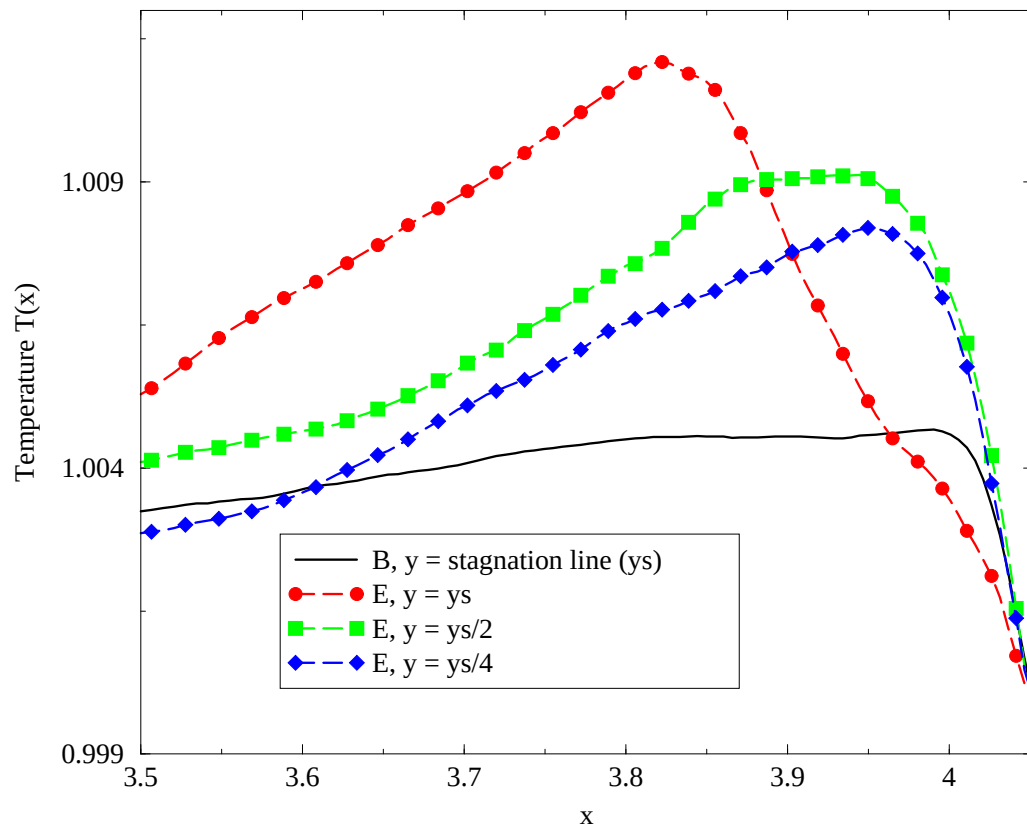


FIG. B.11 – Profil de température dans la direction longitudinale au voisinage du mur.

fort mélange au niveau du point de stagnation est confirmé par les lignes de courant près du mur. Ces lignes de courant sont représentées figure B.12. Deux points principaux doivent être notés : tout d'abord, dans le cas I, il est confirmé que le jet est moins développé à cause des particules qui empêchent les structures turbulentes de se développer comme dans le cas B ou E. De plus, le point important dans le cas E est l'apparition de petits tourbillons dans la zone de stagnation. Ils sont à l'origine d'un mélange turbulent intense et donc d'une réduction importante du transfert de chaleur vu figure B.9.

Les deux dernières courbes (planche B.11) représentent le profil de température dans la couche limite turbulente. Leurs gradients sont plus significatifs et, comme on peut le voir figure B.9, les flux de chaleur sont importants et du même ordre de grandeur que dans le cas I. En effet, dans cette zone, les éjecta ont perdu leur forte vitesse de glissement et ont le même

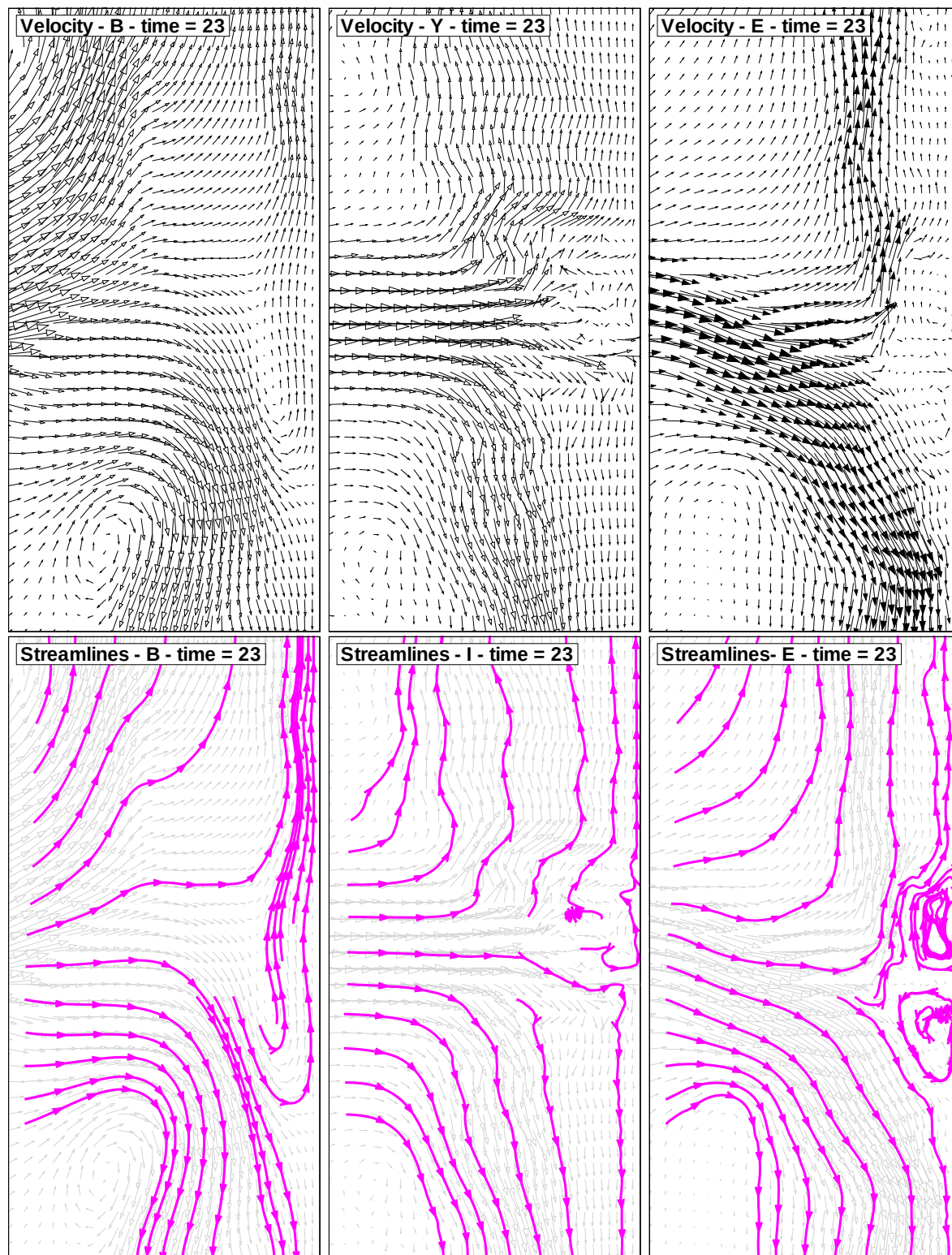


FIG. B.12 – Vecteurs vitesse instantanée et lignes de courant près du mur ($t = 23$). A gauche : cas B, au centre : cas I, à droite : cas E.

comportement que les particules de glace.

B.6 Conclusion

Il a été montré dans ce travail qu'une phase solide dispersée injectée dans un écoulement turbulent peut modifier de façon significative l'échange de chaleur entre le fluide et le mur. La dispersion des particules a de nombreux effets. D'un côté, nous observons une forte modification de la turbulence en amont de la zone d'impact. Cela génère un transfert de chaleur important quand les structures atteignent le mur. De plus, la présence d'éjecta près du mur diminue le transfert de chaleur près du point de stagnation à cause d'un fort mélange turbulent généré durant l'émission d'éjecta.

Néanmoins, les éjecta ont une très faible inertie et ils suivent très rapidement le mouvement de l'écoulement. Ensuite, ils ont un comportement plus conventionnel dans la couche limite turbulente. C'est pourquoi, à une distance plutôt grande du point de stagnation, les transferts thermiques augmentent encore pour atteindre un niveau équivalent au cas à deux phases sans génération d'éjecta.

Remerciements

Les auteurs remercient le 'Commissariat à l'énergie atomique - C.E.A. - Bordeaux' pour son support dans ce travail.

Bibliographie

- [1] T. Baritaud, T.J. Poinso, and M. Baum, editors. *Direct numerical simulation for turbulent reacting flows*. Editions Technip, 1996.
- [2] 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.
- [3] R. Borghi. *The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling*, pages 1–18. In Chang [12], 1996.
- [4] R. Borghi and M. Champion, editors. *Modélisation et théorie des flammes*. Technip, 2000.
- [5] J. Boulanger and L. Vervisch. Diffusion edge-flame: Approximation of the flame tip damköhler number. *Combust. Flame*, accepted, in press, 2002.
- [6] J. Boulanger, L. Vervisch, J. Réveillon, and S. Ghosal. Effects of heat release in laminar diffusion flames lifted on round jets. *Combust. Flame*, 134(4):355–368, 2003.
- [7] S.P. Burke and T.E.W. Schumann. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Chemistry*, (20):998–1005, 1928.
- [8] X. Calimez. *Simulation à petite échelle par une méthode VOF d'écoulement diphasiques réactifs*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1998.
- [9] S. Candel, F. Lacas, N. Darabiha, and C. Rolon. Group combustion in spray flames. *Multiphase Sci. Tech.*, 11:1–18, 1999.
- [10] A. Cessou. *Stabilisation de la combustion diphasique turbulente au dessus d'un injecteur coaxial methanol/air*. PhD thesis, Université de Rouen, 1994.
- [11] A. Cessou and D. Stepowski. Planar laser induced fluorescence measurement of [oh] in the stabilization stage of a spray jet flame. *Combust. Sci. and Tech.*, 118(4-6):361–381, 1996.

- [12] S. H. Chang, editor. *Transport Phenomena in combustion*. Taylor and Francis, 1996.
- [13] N. Chigier. Group combustion models and laser diagnostic methods in sprays : a review. *Combustion and Flame*, 51:127–139, 1983.
- [14] H. H. Chiu and E. J. Croke. Group combustion of liquid fuel sprays. Technical report, Energy Technology Lab Report 81-2, Univ. of Illinois at Chicago, 1981.
- [15] H. H. Chiu, H. Y. Kim, and E. J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. In The combustion institute, editor, *Proceedings of the nineteenth Symposium (International) on combustion*, 1982.
- [16] H.H. Chiu and T.M. Liu. Group combustion of liquid droplets. *Comb. Sci. Technol.*, 17:127–131, 1977.
- [17] C. Crowe, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji, editors. *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC Press, 1998.
- [18] P. Domingo and L. Vervisch. Triple flames and partially premixed combustion in autoignition of nonpremixed turbulent mixtures. In The combustion institute, editor, *Proceedings of the Twenty-Sixth Symposium (International) on combustion*, pages 233–240, 1996.
- [19] J. K. Eaton and J. R. Fessler. Preferential concentration of particles by turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 20(suppl):169–209, 1994.
- [20] S. Elgobashi and G.C. Truesdell. Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. In *Seventh symposium on turbulent shear flows*, Stanford, 1989. Stanford University.
- [21] S. Elgobashi and G.C. Truesdell. Direct numerical simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 242:655–700, 1992.
- [22] V. Eswaran and S.B. Pope. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of the passive scalar. *Phys. Fluids*, 31(3):506–520, march 1988.
- [23] R.S. Miller F. Mashayek, F.A. Jaber and P. Givi. Dispersion and polydispersity of droplets in stationary isotropic turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 23(2):337–355, 1997.
- [24] G.M. Faeth. Evaporation and combustion of sprays. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 9:1–76, 1983.

- [25] V. Favier and L. Vervisch. Edge flames and partially premixed combustion in diffusion flame quenching. *Combust. Flame*, 125(1-2):788–803, 2001.
- [26] G. J. Van Fossen, R. J. Simoneau, and C. Ching. Influence of turbulence parameters, reynolds number, and body shape on stagnation-region heat transfer. *Journal of heat transfer*, 117(3):597–203, 1995.
- [27] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids*, 7(3):1760–1765, 1991.
- [28] P. Givi. Model free simulations of turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 15:1–107, 1989.
- [29] L. Guichard, B. Lecordier, and J. Réveillon. Evaluation des algorithmes utilisés en piv grâce à la simulation numérique directe. In *6ieme Congrès francophone de Vélocimétrie Laser, F-5*. Saint-Louis, France, September 1998.
- [30] L. Guichard, L. Vervisch, and P. Domingo. Two-dimensional weak choc-vortex interaction in a mixing zone. *AIAA journal*, 33(10), october 1995.
- [31] G. Hestroni. Particle-turbulence interaction. *Int. J. Multiphase Flow*, 15(5):735–746, 1989.
- [32] A.C. McIntosh J. B. Greenberg and J. Brindley. Instability of a flame front propagating through a fuel-rich droplet-vapour-air cloud. *Combustion Theory and Modelling*, 3:567–584, 1999.
- [33] D. Kaftori, G. Hestroni, and S. Banerjee. The effect of particles on wall turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 24(3):359–386, 1998.
- [34] A. R. Kerstein and C. K. Law. Percolation in combustion sprays : Transition from cluster combustion to percolate combustion in non-premixed sprays. In The combustion institute, editor, *Proceedings of the nineteenth Symposium (International) on combustion*, 1982.
- [35] K.K. Kuo, editor. *Principles of combustion*. John Wiley and sons, 1986.
- [36] C.K. Law. Recent advances in droplet vaporisation and combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 8:171–201, 1982.
- [37] D. H. Lee, Y. S. Chung, and M. G. Kim. Turbulent heat transfer from a convex hemispherical surface to a round impinging jet. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 42(6):1147–1156,

- 1999.
- [38] D. H. Lee, Y. S. Chung, and S. Y. Won. The effect of concave surface curvature on heat transfer from a fully developed round impinging jet. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 42(13):2489–2497, 1999.
- [39] S. Lee, K. Lele, and P. Moin. Numerical simulations of spatially evolving compressible turbulence. *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs, Stanford*, (126), 1991.
- [40] S. K. Lele. Compact finite difference schemes with spectral like resolution. *J. Comput. Phys.*, (103):16–42, 1992.
- [41] M. Lesieur, C. Staquet, P. Le Roy, and P. Comte. The mixing layer and its coherence examined from the point of view of two dimensional turbulence. *J. Fluid Mech.*, 192:511–534, 1988.
- [42] T. H. Lin, C. K. Law, and S. H. Chung. Theory of laminar flame propagation in off-stoichiometric dilute spray. *Int. J. Heat Mass Transfert*, 31(5):1023–1034, 1988.
- [43] T. H. Lin and Y. Y. Sheu. Theory of laminar flame propagation in near stoichiometric dilute spray. *Combustion and Flame*, 84:333–342, 1991.
- [44] F. Mashayek. Simulations of reacting droplets dispersed in isotropic turbulence. *AIAA Journal*, 37(11):1420–1425, 1999.
- [45] L. Mathieu and J. Scott. *An introduction to turbulent flow*. Cambridge University Press, 2000.
- [46] R.S. Miller and J. Bellan. Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream. *Journal of fluids mechanics*, 384:293–338, 1999.
- [47] Y. Mizutani. *Combustion Science and Technology*, 6:11–21, 1972.
- [48] R. Seiser N. Peters, G. Paczko and K. Seshadri. Temperature cross-over and non-thermal runaway at two-stage ignition of n-heptane. *Combustion and Flame*, 128(1-2):38–59, 2002.
- [49] M. R. Overholt and S. B. Pope. A deterministic forcing scheme for direct numerical simulation of turbulence. *Computer and Fluid*, 27:11–28, 1998.

- [50] M. Sichel P.B. Patil and J.A. Nicolls. *Combustion Science and Technology*, 18:31–31, 1978.
- [51] T. Poinso, S. Candel, and A. Trouvé. Direct numerical simulation of premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 12:531–576, 1996.
- [52] T. Poinso and S. K. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 1(101):104–129, 1992.
- [53] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, 2001.
- [54] C.E. Polymeropoulos. *Combustion Science and Technology*, 9:197–207, 1974.
- [55] C.E. Polymeropoulos. *Combustion Science and Technology*, 40:217–232, 1984.
- [56] S. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University, 2000.
- [57] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, 1992.
- [58] J. Réveillon. *Simulation numérique des grandes structures appliquée aux flammes turbulentes non-prémélangées*. PhD thesis, Université de Rouen, 1996.
- [59] J. Réveillon and L. Vervisch. Subgrid-scale turbulent micromixing : Dynamic approach. *AIAA Journal*, 36(3):336–341, March 1998.
- [60] J. Réveillon and L. Vervisch. Accounting for spray vaporization in non-premixed turbulent combustion modeling: A single droplet model (sdm). *Combustion and Flame*, 1(121):75–90, 2000.
- [61] G.A. Richards and P.E. Sojka. A model of h₂-enhanced spray combustion. *Combustion and Flame*, 79:319–332, 1990.
- [62] J.J. Riley. PhD thesis, The Johns Hopkins University, Baltimore, Maryland, 1971.
- [63] J.J. Riley and G.S. Patterson. Diffusion experiments with numerically integrated isotropic turbulence. *Phys. Fluids*, (17):292–297, 1974.
- [64] J.R. Ristorcelli and G.A. Blaisdell. Consistent initial conditions for the dns of compressible turbulence. Technical report, ICASE, 1997. ICASE Report 96-49.
- [65] R. S. Rogallo. Numerical experiments in homogeneous turbulence. Technical report, NASA, 1981. Technical Memorandum No. 81315.

- [66] G.R. Ruetsch, L. Vervisch, and A. Liñán. Effects of heat release on triple flame. *Phys. Fluids*, 6(7):1447–1454, 1995.
- [67] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. *SIAM J. Appl. Math*, 51(5):1284–1303, 1991.
- [68] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. *Atomization and Sprays*, 2(3):131–224, 1992.
- [69] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. Stoichiometry and polydisperse effects in premixed spray flames. *Combustion and Flame*, 93:97–118, 1993.
- [70] W. A. Sirignano. Fuel droplet vaporization and spray combustion theory. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 8:291–322, 1983.
- [71] K. D. Squires and J. K. Eaton. Measurements of particle dispersion obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *Journal of fluids mechanics*, 226:1–35, 1991.
- [72] K. D. Squires and J.K. Eaton. Measurements of particle dispersion obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 226:1–35, 1990.
- [73] T. Suzuki and H.H. Chiu. Multi droplet combustion on liquid propellants. In *Proceedings of the Ninth International Symposium on Space and Technology and Science*, pages 145–154, Tokyo, Japan, 1971. AGNE.
- [74] P. Versaevél. *Combustion laminaire diphasique : Etude théorique et expérimentale*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1996.
- [75] L. Vervisch, B. Labegorre, and J. Réveillon. *Fuel*, Accepted in press.
- [76] L. Vervisch and T. Poinso. Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flame. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, (30):655–692, 1998.
- [77] P. R Voke and S. Gao. Numerical study of heat transfer from an impinging jet. *Int. J. Heat Mass Tranfer*, 41(4-5):671–680, 1998.
- [78] M. R . Wells and D. E. Stock. The effects of crossing trajectories on the dispersion of particles in a turbulent flow. *Journal of fluids mechanics*, 136:31–62, 1983.
- [79] F. A. WILLIAMS. Progress in spray combustion analysis. In The combustion institute, editor, *Proceedings of the 8th Symposium (International) on combustion*, 1960.

- [80] A. A. Wray. Minimal storage time-advancement schemes for spectral methods. Technical report, Center for turbulence research Report, Stanford University, 1990.