



HAL
open science

Contribution à la modélisation de la combustion turbulente des milieux à deux phases

François-Xavier Demoulin

► **To cite this version:**

François-Xavier Demoulin. Contribution à la modélisation de la combustion turbulente des milieux à deux phases. Dynamique des Fluides [physics.flu-dyn]. Université de Provence - Aix-Marseille I, 1999. Français. NNT: . tel-00011687

HAL Id: tel-00011687

<https://theses.hal.science/tel-00011687>

Submitted on 27 Feb 2006

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.

Contribution à la modélisation de la combustion turbulente des
milieux à deux phases

Demoulin François-Xavier

17 Décembre 1999

Chapitre 1

Remerciements

Je dédie cette thèse à la plus merveilleuse personne, ma femme, Marie-Edmée ...

Dans ce travail j'étais soutenu, encouragé, guidé par de nombreuses personnes, sans lesquelles rien n'aurait été possible.

Tout d'abord ma famille: ma femme, mes parents Marie-Noëlle et René, mon frère Pierrick et ma soeur Christine, s'ils n'ont pas participé au contenu scientifique, ils sont mon support et mon moteur pour tout le reste.

Durant toutes ces années M. Borghi m'a dirigé, il m'a d'abord montré la direction du soleil, je suis venu à Marseille... Il m'a de plus conseillé et m'a apporté une direction scientifique de haut niveau, j'ai beaucoup appris en le côtoyant, je ne saurai jamais assez le remercier.

J'ai aussi appris beaucoup au contact d'Alexei Burluka avec qui j'ai eu des discussions passionnantes et de temps en temps endiablées.

Je tiens aussi à remercier tous les membres du jury qui m'ont fait l'honneur de participer à ma soutenance de thèse.

Mes amis les plus proches ont contribué au moral des troupes, ce qui est indispensable pour bien travailler: Tony Briffard, Selim Aït Aïssa, Daniel Mazzoni, Arnaud Mura, Grégory Blokkeel, Thomas Frisch, Laurent Duchemin, Fabien Sorel, Benoit Fécamp, Sven Eisenbach...

Il m'est impossible de citer toutes les personnes que j'ai embêtées avec tel ou tel problème, qui m'ont aidé et sans qui il m'aurait été impossible d'avancer. Je tiens néanmoins à remercier tout spécialement:

- Le personnel de l'ESM2, qui m'a accueilli durant ma première année de thèse et qui m'a aidé durant les trois années, notamment Olivier Pagé, Olivier Boiron, David Césari, Nicolas Péliissier, Jean-Michel Innocent, Gérard Tavéra, Robert Péliissier ...
- Le personnel du laboratoire IRPHE, notamment: Richard Kotarba, Philippe Dussouillez, Cathy Paitel ...
- Le personnel du département de Mechanical Engineering de l'Université de Leeds, notamment: Frank Atzler, Robert Wooley, Malcom Lawes, Derek Bradley ...
- Le personnel de la DR de Renault, notamment Christophe Buchou, Christophe Maries, Swan Desporte, Fabienne Galzin, Lionel Sainsolieu, Frédéric Nédélec, Mme Servant ...
- Le personnel du laboratoire Le CORIA de Rouen, notamment: Rachid Saïd, Luc Vervisch, Julien Reveillon, Mikhael Gorokhovski, Pascal Durand ...

J'ai certainement dû oublier des personnes qui, me connaissant, comprendront que c'est vraiment un oubli.

Chapitre 2

Introduction

Les travaux effectués durant cette thèse sont dédiés à la compréhension et la modélisation de la combustion qui prend place dans les milieux diphasiques et turbulents. Malgré les problèmes de pollution, la diminution des ressources pétrolifères, l'énergie de base pour de nombreuses technologies reste l'oxydation d'un combustible initialement liquide. Aussi, même si à long terme cette source d'énergie pourrait être remplacée par d'autres moins polluantes et plus renouvelables, il est de plus en plus nécessaire aujourd'hui de mieux maîtriser tous les processus mis en jeu. Le traitement de tous les aspects du problème: mélange, vaporisation, cinétique chimique, diffusion, stabilité des fronts de propagation, est réalisé par tous les moyens: théoriques, expérimentaux, numériques à travers la science qui lui est dédiée: la combustion.

De grandes avancées ont déjà été effectuées, les principales sont esquissées par exemple dans l'ouvrage du CNRS: "Modélisation de la combustion" [28]. Beaucoup de travaux ont été effectués sur la modélisation des flammes laminaires et des flammes turbulentes en milieu gazeux, mais très peu sur les flammes de brouillards de gouttes. C'est cet aspect qui fera l'objet des travaux de cette thèse et plus précisément la combustion turbulente en milieu diphasique.

Celle-ci se rencontre fréquemment dans les applications pratiques telles que four industriel, moteur de fusée cryotechnique et pour la partie qui nous intéresse dans les moteurs diesel et les moteurs à essence à injection directe. Pour améliorer le fonctionnement de toutes ces applications il est nécessaire de faire progresser les aspects théoriques, expérimentaux et numériques. Notre but est d'essayer de construire une modélisation de la combustion turbulente diphasique qui permettra de simuler numériquement le mieux possible le fonctionnement de toutes ces applications.

Le premier chapitre comprend tout d'abord une description de la combustion qui a lieu dans les moteurs à combustion interne. Celle-ci met en évidence l'importance de la combustion turbulente en milieu diphasique pour ce type de technologie. Une seconde partie est alors dédiée à la description plus fine de ce type de flamme d'un point de vue théorique et expérimental.

Le second chapitre sert à établir d'abord les équations locales exactes d'un fluide réactif diphasique, celles-ci permettent ensuite une écriture formelle des équations moyennes. Ces équations sont celles qui seront vraiment résolues mais elles font apparaître des termes non fermés.

L'objet du troisième chapitre est de modéliser les termes non fermés qui le nécessitent.

Il s'agit notamment des termes liés aux échanges moyens entre la phase liquide et la phase gazeuse, mais aussi des termes de réactions chimiques moyens qui, comme en milieu turbulent, posent problème.

Les équations ainsi fermées sont résolues dans le quatrième chapitre dans deux cas différents. Le premier cas consiste en une flamme diphasique turbulente de type jet. Le deuxième cas représente l'auto-inflammation et la combustion d'un jet de combustible dans une configuration qui se rapproche du moteur Diesel.

Chapitre 3

Position du problème

Notre but est de comprendre, modéliser et simuler la combustion telle qu'elle existe dans les moteurs à combustion interne. Nous verrons dans ce chapitre quelles solutions techniques sont utilisées dans les moteurs pour brûler le carburant. Nous décrirons ensuite les flammes induites par les différents procédés mis en œuvre.

3.1 La combustion dans les moteurs

3.1.1 Aperçu des moteurs à explosion et de leurs futurs développements

Les exemples de machines thermiques servant à transformer l'énergie contenue généralement dans un combustible liquide en une énergie mécanique sont nombreux. Nous décrirons la combustion qui prend place dans les moteurs de traction utilisés pour les automobiles et les véhicules industriels. Bien-sûr les résultats de cette étude pourraient être étendus au moteur de fusée, d'avion ou tout autre moteur ou machine où la combustion prend place dans un milieu diphasique.

Les moteurs sont rangés en deux classes différentes, les moteurs à allumage commandé ou moteurs à essence et les moteurs Diesel. Ces derniers sont dus à l'ingénieur allemand Rudolf Diesel qui déposa le brevet le 1^{er} janvier 1893. Ils sont maintenant très utilisés pour les poids-lourds, les voitures, les bateaux et dans de nombreux systèmes industriels. De nos jours des tentatives sont faites pour remplacer ces deux types de moteurs par des moteurs électriques, des turbines à gaz ou des moteurs fonctionnant à partir de piles à combustible. Il semblerait qu'il ne soit pas encore possible de retrouver tous les bénéfices des moteurs classiques grâce à ces moteurs de substitutions. Il est par contre possible d'associer ces nouvelles technologies à des moteurs classiques mais plus petits. Ces machines hybrides contiendront donc encore des moteurs à explosion. Les recherches actuelles sur ces moteurs sont motivées principalement par un souci de préservation de l'environnement et d'économie d'énergie.

Les problèmes liés au tarissement des ressources pétrolières dans les prochaines décennies ainsi que les normes antipollutions de plus en plus sévères pèsent très fortement sur cette technologie. Face à ces problèmes les ingénieurs motoristes améliorent de plus en plus les techniques pour augmenter le rendement de ces moteurs ainsi que l'efficacité de la combustion qui y prend place.

Un meilleur rendement permet de limiter la consommation de carburant ce qui est bénéfique pour préserver les réserves de pétrole. De plus cela diminue la quantité de polluant émise quand elle est proportionnelle à la quantité de carburant brûlé. Ceci est directement vrai

pour le dioxyde de carbone qui est un produit direct de la combustion. L'apparition d'autres polluants, comme les produits azotés ou les suies, ne dépend pas uniquement de la quantité de combustible brûlé mais aussi de la façon dont s'est déroulée la combustion.

Dans un moteur à essence classique le comburant et le combustible sont mis en présence et se mélangent dans la tubulure d'admission avant le début de la combustion qui est déclenchée par une étincelle. Plus la pression est élevée après la phase de compression, plus la température dans le cylindre augmente. Pour un moteur à essence une trop grande température de fin de compression favorise l'apparition d'auto-allumage incontrôlé. Ce phénomène porte le nom de cliquetis, il a pour conséquence un pic de pression très brusque, un transfert de chaleur aux points d'allumage et une fatigue excessive des organes mécaniques du moteur. Dans le moteur Diesel le comburant et le combustible sont injectés séparément, l'un par la soupape et l'autre par un injecteur. La combustion se fait par auto-inflammation autour du jet de combustible. Ceci empêche l'apparition de cliquetis et on utilise un meilleur rapport volumique de compression, plus fort:

$$\varepsilon = \frac{V + V_0}{V_0}, \quad (3.1)$$

où V est le volume balayé par le piston et V_0 est le volume résiduel au point mort haut.

Sous certaines hypothèses [67] l'étude théorique du cycle thermodynamique de Beau de Rochas pour le moteur à essence conduit à une estimation du rendement théorique η_{th} :

$$\eta_{th} = \frac{\text{Travail théorique disponible}}{\text{Energie thermique dépensée}} = 1 - \frac{1}{\varepsilon^{\gamma-1}}, \quad (3.2)$$

où $\gamma = 1,4$ est une constante.

L'étude théorique avec les mêmes hypothèses du cycle Diesel conduit à :

$$\eta_{th} = 1 - \frac{1}{\gamma \varepsilon^{\gamma-1}} \frac{\delta^\gamma - 1}{\gamma - 1}, \quad (3.3)$$

où δ est le rapport du volume occupé par le gaz à la fin de combustion sur celui occupé par les gaz au début de la combustion. Ainsi un meilleur rapport volumique de compression permet d'obtenir de meilleurs rendements dans les deux cas. La possibilité d'obtenir de hauts taux de compressions volumiques est l'atout majeur du moteur Diesel.

Notons que le nouveau terme dans l'équation du rendement théorique δ varie comme le temps mis par le combustible pour brûler complètement. Plus δ est petit, meilleur est le rendement. Donc il faut que le mélange du fuel avec l'oxydant et ensuite la combustion soient les plus rapides possibles.

Une autre caractéristique du moteur Diesel est que la combustion prend place dans un milieu globalement pauvre. Ceci entraîne des températures de fin de combustion globalement plus basses que pour le moteur à essence. Celui-ci pour pouvoir être allumé doit avoir une richesse globalement proche de un. Comme des températures très élevées sont nécessaires pour activer les réactions de formation de certains polluants comme le NOx, on tend à diminuer dans le Diesel leur apparition. De plus la température maximale des parois de la chambre de combustion ne peut dépasser une certaine limite fixée par le type de matériel utilisé. Donc plus la température de combustion sera éloignée de celle des parois plus l'écart de température sera grand et plus les pertes thermiques seront importantes.

L'intérêt du moteur Diesel est donc encore réel de nos jours mais il possède aussi certains désavantages notamment vis à vis du moteur à essence. Premièrement le raisonnement précédent

à partir des cycles thermodynamiques théoriques montre qu'à rapport volumique de compression égal le moteur à essence aurait un meilleur rendement. Deuxièmement, le combustible et le comburant n'étant pas prémélangés la combustion ne se déroule pas partout à une richesse constante et bien déterminée pour le moteur Diesel. Ceci se traduit par l'apparition de particules de suies dues à des points de combustion ayant eu lieu à des richesses trop élevées. Troisièmement la combustion ayant lieu en milieu globalement pauvre le volume balayé par le piston n'est pas pleinement exploité. Donc à cylindrée égale le moteur Diesel est moins puissant. Il faut alors, pour tracter le même véhicule avec des performances équivalentes, un moteur Diesel plus gros plus lourd et plus cher qu'un moteur à essence. Ceci motive un ensemble de projets visant à tirer parti des qualités des deux types de moteur. Ils ont donné naissance au moteur à essence à charge stratifiée, voir [3.1.3], dans lequel l'injection du combustible se fait, comme en Diesel, dans la chambre, mais l'inflammation est provoquée par une étincelle après avoir laissé le temps pour un mélange partiel.

Il est donc clair que les deux types de moteurs ont des avantages, pour atténuer leurs inconvénients on peut rajouter des éléments extérieurs au moteur. Ainsi pour combler le manque de puissance on équipe les moteurs Diesel d'une pompe qui introduit plus d'air dans la chambre de combustion à volume égal. Ceci permet alors de brûler plus de fuel par cycle et d'augmenter la puissance du moteur à cylindrée égale. Pour diminuer les émissions polluantes on ajoute un dispositif qui agit sur les gaz brûlés dans l'échappement. Pour le moteur à essence il s'agit d'un pot d'échappement qui catalyse les réactions chimiques de destruction des polluants. Ce dispositif est plus difficile à mettre au point pour le moteur Diesel où il y a généralement un excès d'air qui rend difficile la catalysation du NO. On équipe d'autre part les moteurs Diesel d'un filtre à particules qui est censé retenir les suies produites lors de la combustion. Ces dispositifs sont onéreux et ne comblent qu'en partie les défauts des moteurs. C'est pourquoi il est plus intéressant de contrôler directement les phénomènes physiques qui se passent dans la chambre de combustion du moteur. Nous nous intéressons donc à la chambre de combustion du moteur Diesel et nos travaux pourront s'étendre aussi en partie au moteur à essence à injection directe qui est le meilleur compromis entre le moteur Diesel et le moteur à essence classique.

3.1.2 Chambres de combustion du moteur diesel

Le principe du moteur à combustion interne est de transformer l'énergie chimique contenue dans le carburant en une énergie mécanique sur l'arbre moteur. Le carburant provient généralement du pétrole, bien que du gaz naturel ou même certains alcools tel que le méthanol sont aussi utilisés. C'est un produit chimique organique, composé principalement de chaînes de carbone plus ou moins longue et d'hydrogène. Il est généralement stocké sous forme liquide pour obtenir un bon rapport entre l'énergie stockée et le volume de stockage. Pour le moteur diesel on utilise généralement des chaînes carbonées assez longues comme le dodécane.

Pour libérer l'énergie chimique on brûle ce carburant en utilisant l'oxygène contenu dans l'air. Cette réaction d'oxydation se passe en phase gazeuse, ce qui entraîne que le fuel avant d'être brûlé devra être vaporisé. Le fuel gazeux devra ensuite être mélangé avec l'air pour atteindre une richesse à laquelle la réaction chimique peut se produire. De plus cette réaction ne pourra se produire que si la température du mélange est suffisante pour l'allumer.

Il faut donc réaliser dans la chambre à combustion du moteur diesel l'injection et l'évaporation du combustible, puis son mélange avec l'air et enfin sa combustion. Ce moteur est à quatre temps: admission, compression, détente et échappement. La combustion commence un peu

avant la fin de la compression et se termine un peu après le début de la détente. Durant la phase d'admission de l'air frais pénètre dans le moteur, sa température augmente durant la phase de compression. Grâce au fort rapport volumique de compression du moteur Diesel la température des gaz en fin de compression permet l'inflammation du gasoil.

Le fuel est alors injecté dans la chambre grâce à une forte pression, plusieurs centaines de bars. L'injecteur est composé d'un réservoir de carburant maintenu à forte pression et d'un ou plusieurs trous fermés par une aiguille, voir figure 3.1. Lors de l'injection l'aiguille se soulève

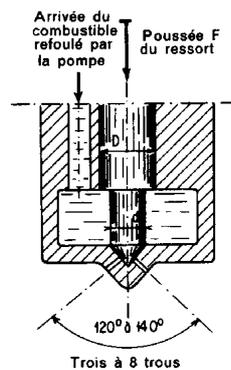


FIG. 3.1 – Schéma d'un injecteur pour moteur diesel

et le fuel est introduit avec des vitesses très élevées de l'ordre de plusieurs centaines de mètres par seconde. Différents types d'injections sont représentés figure 3.2.

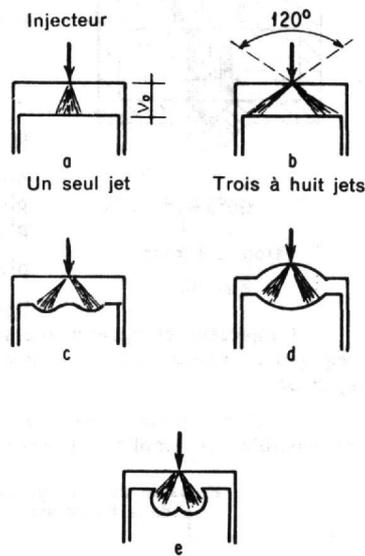


FIG. 3.2 – Différents types d'injections pour moteur diesel

Lorsque le jet pénètre dans la chambre il est très perturbé car l'écoulement du liquide est fortement turbulent. Dans certains cas il peut se former de petites bulles de cavitation

dans l'injecteur qui réduisent le diamètre efficace du trou de l'injecteur. Une fois sorti de l'injecteur, le frottement entre le liquide et l'air quasiment au repos déstabilise rapidement le jet, on parle d'atomisation primaire. Le jet se transforme en parcelles de liquide qui sont encore déstabilisées pour former des gouttes, on parle d'atomisation secondaire, voir figure 3.3. L'atomisation sert à augmenter l'interface liquide-gaz de façon à améliorer les échanges à la surface, notamment la vaporisation.

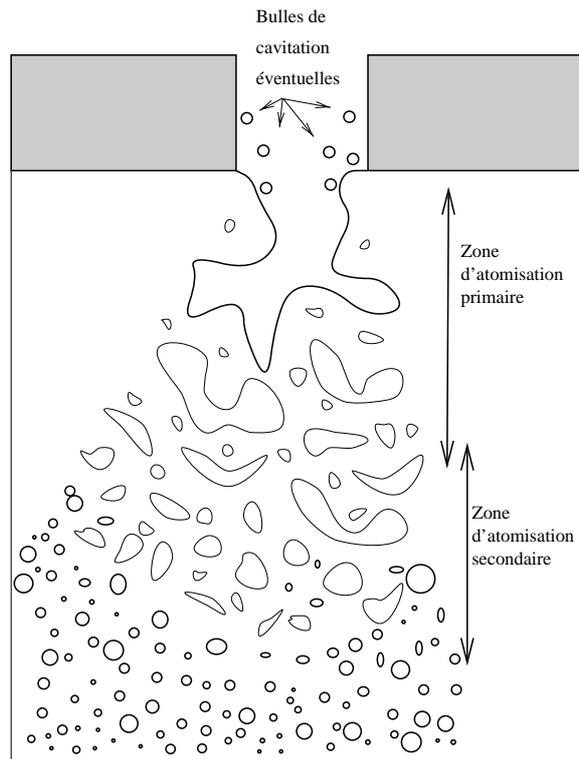


FIG. 3.3 – Atomisation d'un jet de carburant

Plus la différence de vitesse entre le liquide et le gaz est grande plus les échanges à la surface sont importants et donc plus le taux d'évaporation est fort. Durant la phase très instationnaire où le jet pénètre dans la chambre de combustion le maximum de concentration de vapeur de fuel devrait se situer en tête et en périphérie du jet. En effet c'est là que les premières parcelles de liquide se sont vaporisées et depuis le plus longtemps. De plus les échanges avec l'air chaud extérieur y sont intenses ce qui maintient une température élevée. C'est sans doute aussi dans cette zone que la richesse et la température qui fluctuent, permettent l'inflammation du mélange localement, on parle de points chauds. Dans un moteur diesel équipé d'accès visuels il est possible de voir ce qui se passe directement dans la chambre de combustion [7]. Nous avons représenté sur la Figure: 3.4 deux images négatives tirées de cet article. On voit l'emplacement du liquide à droite par fluorescence induite par un laser à Argon. Au même instant une visualisation directe grâce à une camera rapide permet de localiser l'emplacement des points d'auto-inflammations. Dans la partie gauche, la lumière la plus vive, en noire sur l'image, est émise par la combustion. La fluorescence moins lumineuse, en gris sur la photo, est située sur la partie de droite. Il y a en même temps plusieurs sites d'auto-allumage qui

sont situés sur le bord du jet pour le premier cas, photo du haut, et en tête du jet pour le deuxième cas, photo du bas.

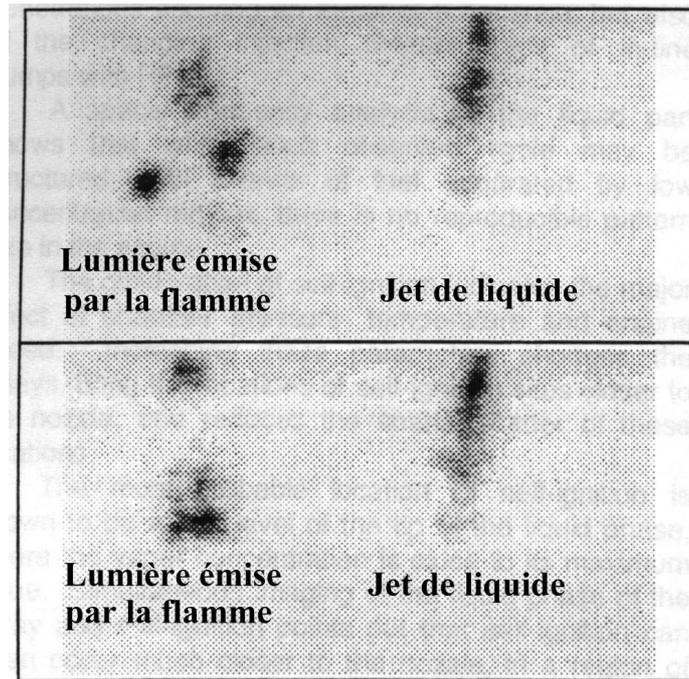


FIG. 3.4 – Photos négatives dans un moteur diesel pour deux cycles différents (photo du haut et photo du bas). Chaque photo représente les images simultanées de l'auto-inflammation (à gauche) et la lumière diffusée par le liquide (à droite). En juxtaposant le jet visible à droite et la lumière émise par la combustion à gauche, on peut voir l'emplacement des sites d'auto-inflammation par rapport au jet de carburant.

A partir du moment où les premiers sites favorables se sont auto-enflammés, commence la phase de combustion rapide. Les premières apparitions de gaz brûlés provoquent une augmentation de la température moyenne et de la pression moyenne. Tout le gaz qui est déjà partiellement mélangé et qui est lui aussi proche des conditions d'auto-inflammation a encore plus de chance de s'auto-enflammer. D'autre part le milieu étant partiellement prémélangé autour des points déjà enflammés, il est possible que de petites flammes se propagent. Ces flammes devraient être de type flammes triples. Elles se propagent dans la direction la plus facile c'est-à-dire le long des iso-surfaces où la richesse est un. D'un côté de la flamme le milieu est pauvre et de l'autre côté le milieu est riche. Derrière ce front prémélangé se met en place une flamme de diffusion qui sert de frontière entre le milieu riche et le milieu pauvre. Nous avons schématisé ce processus sur la Figure: 3.5.

Notons que cette flamme se propage vers un milieu prémélangé où les conditions d'auto-inflammation sont très favorables, richesse proche de un et température suffisamment élevée. Donc il n'est pas sûr que ce soit la diffusion de la chaleur qui contrôle le phénomène comme cela se produit habituellement pour la propagation des flammes prémélangées. La propagation de la flamme pourrait être devancée par la multiplication des sites d'auto-allumage devant la flamme. Dans ce cas la combustion le long des iso-surfaces serait très rapide et n'est pas

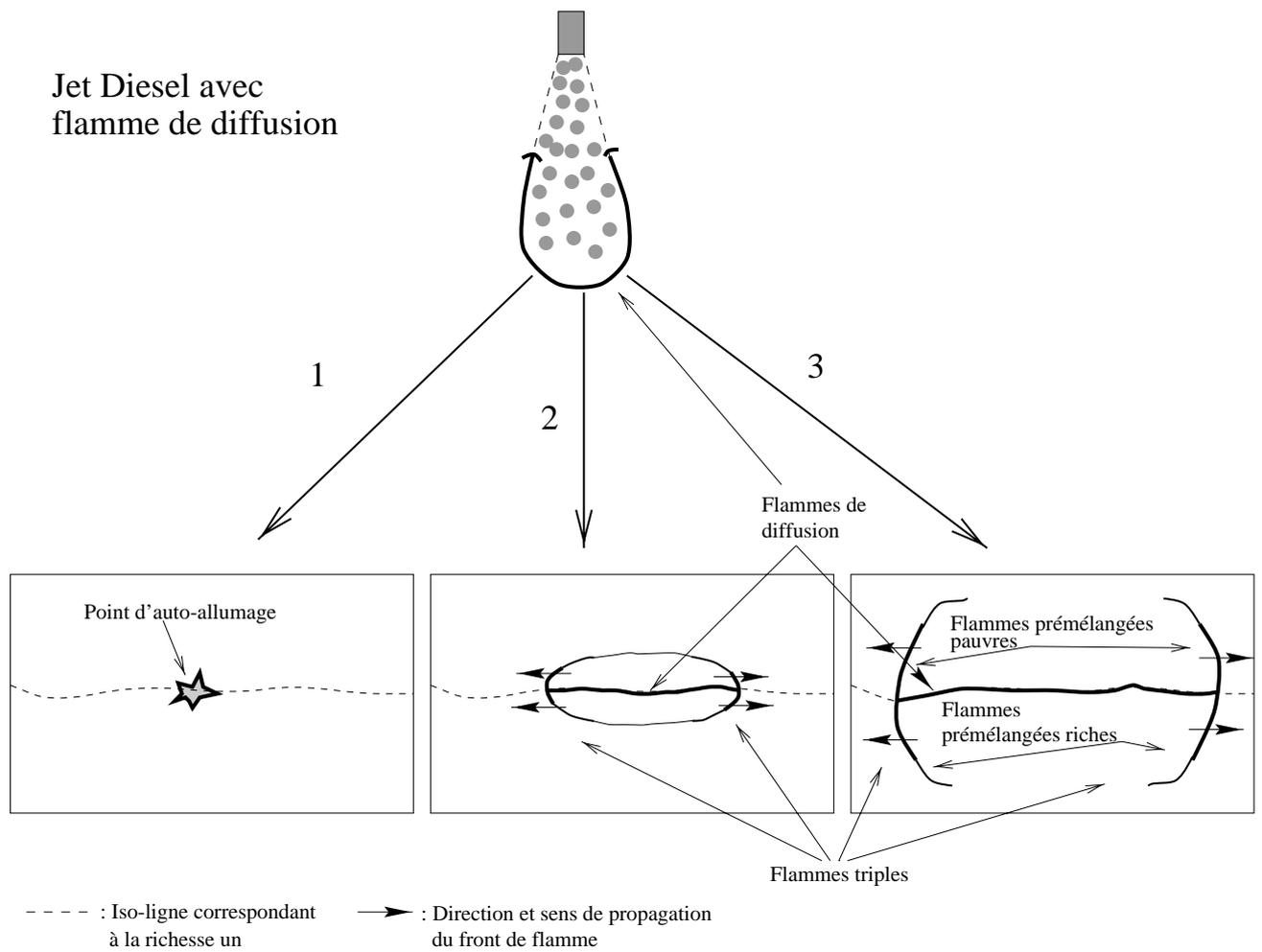


FIG. 3.5 – *Etablissement de la flamme de diffusion après l'auto-allumage en supposant un mécanisme basé sur la propagation de flammes triples*

contrôlée par un mécanisme de propagation. Par contre dans la direction perpendiculaire à cette surface vers le milieu pauvre et le milieu riche, devrait se propager des flammes prémélangées. Elles devraient s'éloigner jusqu'à atteindre l'endroit où le milieu est trop pauvre ou trop riche pour que la combustion puisse avoir lieu. Ce processus est schématisé sur la Figure: 3.6.

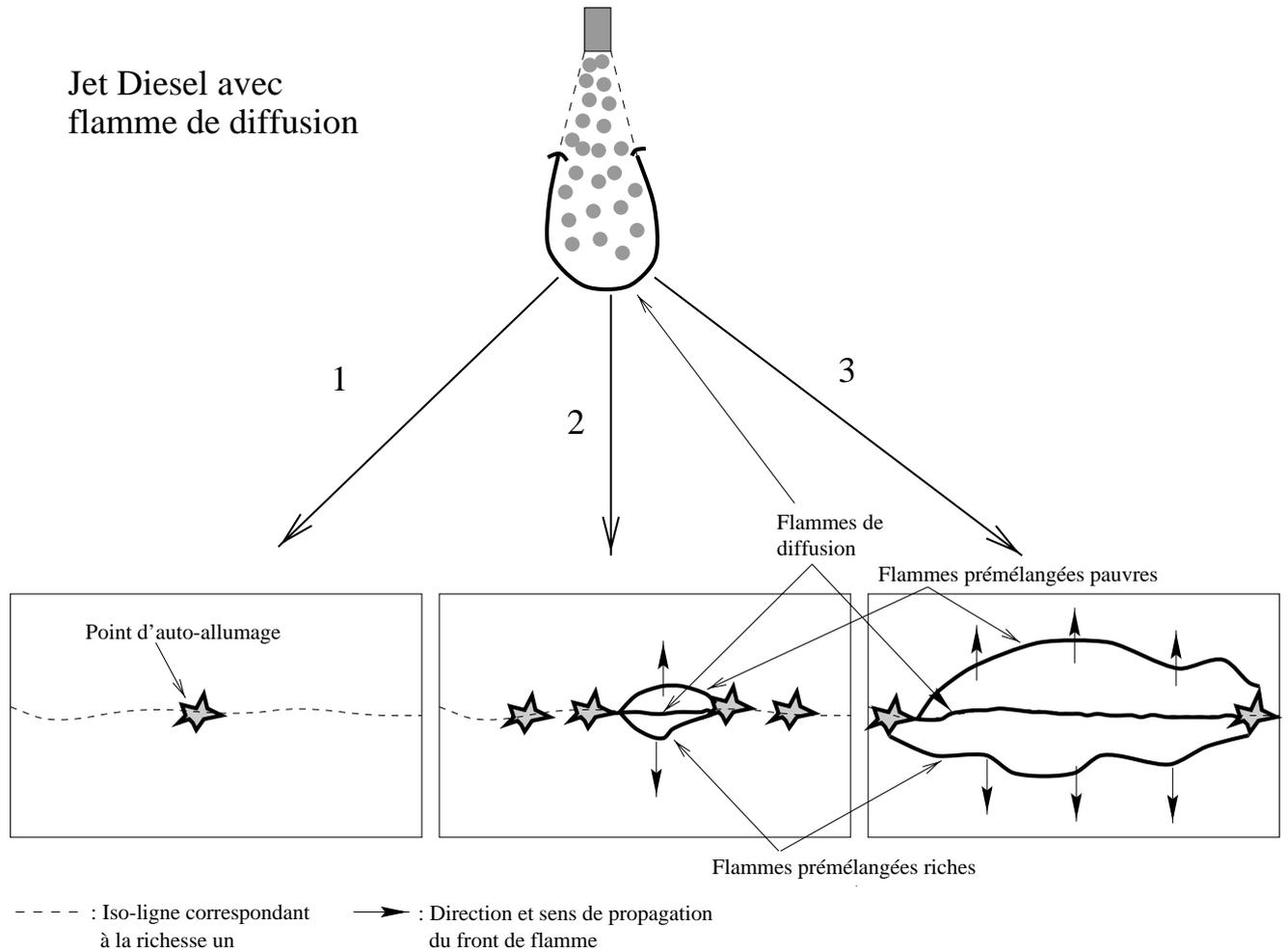


FIG. 3.6 – *Etablissement de la flamme de diffusion après l'auto-allumage en supposant un mécanisme basé sur une multiplication des points d'auto-inflammations*

Finalement ces deux processus qui peuvent coexister, engendrent l'un comme l'autre une flamme de diffusion. C'est ce type de flamme qui consomme la majorité du combustible. Elle provient du fait que globalement le combustible et le comburant ne sont pas mélangés avant le début de la combustion. Il reste donc une zone très riche en moyenne vers le centre du jet et une zone très pauvre à l'extérieur du jet. Localement la flamme de diffusion est la résultante de la flamme de prémélange pauvre qui laisse un milieu contenant des gaz brûlés chauds et un excès d'oxygène et de la flamme de prémélange riche qui laisse un milieu composé de gaz brûlés chauds et un excès de fuel. A la frontière ces deux milieux se mélangent réunissant des gaz chauds du fuel et de l'oxygène ce qui déclenche la réaction chimique.

Les flammes de diffusion ne possèdent pas de vitesse de propagation. Le taux de combustion dépend de la vitesse du processus de mélange ou de diffusion. C'est celui-ci qui met en présence le fuel et l'oxydant qui sont de part et d'autre du front de flamme et aussi qui évacue vers l'extérieur les gaz brûlés produits par la flamme. Cependant si le mélange devient trop fort il est possible que le flux de réactif qui arrive au niveau du front de flamme devienne plus grand que ce que la réaction chimique est capable de consommer. Comme de plus les réactifs sont froids à l'origine, le mélange tend à évacuer de la chaleur du front de flamme vers l'extérieur. Si ce phénomène est trop intense il est possible que la température au niveau du front de flamme devienne trop faible pour que la réaction chimique ait lieu. Dans ce cas la flamme s'éteint, il n'y a plus de transformation de gaz frais en gaz brûlés. Pour un moteur Diesel, comme les gaz avant combustion sont déjà chauds, il est plus difficile d'avoir des extinctions locales.

Dans le moteur diesel la réaction chimique peut avoir lieu aussi du côté riche du front de flamme où il y a un excès de fuel. Cet excès va influencer la combinaison de réactions chimiques qui composent la combustion. Le combustible est généralement composé d'une grande chaîne carbonée qui, lors de chocs avec les atomes qui composent l'air, se casse pour former d'autres composés carbonés et des radicaux. Globalement ces composés et ces radicaux finissent par se recombinaison pour former les produits principaux de la combustion: la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone. Cependant certaines espèces intermédiaires subsistent ou persistent longtemps après la fin de la combustion. Notamment dans un milieu riche, l'excès de fuel favorise les chocs entre composés carbonés. Dans certains cas le résultat est un agglomérat de particules de carbone qui forme des suies. On retrouvera une partie de ces suies dans les gaz d'échappement, bien qu'elles puissent être en partie rebrûlées avant la fin de la combustion.

Dans un moteur diesel le mélange du fuel et de l'air commence quasiment en même temps que la combustion. Afin d'empêcher qu'il reste du fuel qui ne brûle pas, faute d'avoir rencontré de l'oxygène, la chambre de combustion est remplie avec un excès d'air. Ce qui permet de réduire la probabilité d'avoir du fuel non brûlé. Cela permet aussi de baisser la température maximale dans le cylindre et ainsi limiter les pertes thermiques aux parois. De plus les particules de suies formées dans les poches de combustion riches, initiées principalement à l'allumage, vont être entourées d'air chaud en fin de combustion. Elles peuvent brûler alors à la manière de particules de charbon et seront en partie éliminées. Cependant on ne peut augmenter l'excès d'air qu'au détriment de la puissance du moteur. Une autre solution pour favoriser la combustion du fuel est alors d'augmenter la rapidité du mélange. Ceci peut se faire en augmentant le taux de turbulence qui a lieu dans la chambre de combustion par exemple en introduisant un mouvement de swirl. On cherche aussi à améliorer l'atomisation et la dispersion du jet liquide de fuel. Pour cela les pressions d'injection sont de plus en plus fortes, notamment avec le système 'common rail' on peut atteindre des pressions de l'ordre d'un millier de bars. De cette façon la vitesse de sortie au nez de l'injecteur du liquide est très grande devant la vitesse des gaz environnants, ce qui favorise l'atomisation du jet. On obtient ainsi des gouttes plus petites et plus dispersées qui se vaporisent plus vite, ce qui améliore l'homogénéisation du mélange. En plus on utilise préférentiellement des injecteurs multi-trous pour mieux répartir le liquide dans toute la chambre comme sur la Figure: 3.2, $b \rightarrow e$.

3.1.3 Chambre de combustion du moteur essence à injection directe

La combustion que l'on va rencontrer dans un moteur à essence est de type globalement prémélangée alors que celle du moteur Diesel est non prémélangée. C'est-à-dire que le mélange

du carburant avec l'air s'effectue avant la combustion. Donc à un moment il existe un mélange de fuel et d'oxygène avec une richesse qui permettrait la combustion. Généralement ce mélange est réalisé en dehors de la chambre grâce à un carburateur ou plus récemment en injectant l'essence directement dans la tubulure d'admission, Figure: 3.7. Dans les deux cas le mélange commence suffisamment tôt pour que la richesse soit uniforme au moment de l'allumage. Afin que l'inflammation ne se produise pas, la température des gaz doit être plus basse que la température correspondant à l'auto-allumage du mélange. Ce mélange inflammable pose des problèmes de sécurité, car le moindre point chaud pourrait entraîner la combustion même si l'on n'est pas encore dans la chambre de combustion.

Le prémélange est ensuite introduit dans la chambre de combustion durant la phase d'admission. Pour que celui-ci s'enflamme, il faut alors l'allumer, on utilise pour cela une étincelle électrique. Ceci permet de contrôler précisément le moment de la combustion, on parle de moteur à allumage commandé. Pour que la température de fin de compression reste modérée le taux de compression volumique doit être restreint, ce qui handicape le rendement du moteur essence. De plus pour que l'allumage se produise, il faut que la richesse du mélange ne soit pas trop éloignée de un. Donc il n'est pas possible avec cette technique de bénéficier des avantages du moteur Diesel induit par une richesse globale faible. Cependant comme la richesse est uniforme et toujours inférieure ou égale à un, la combustion se passe mieux et la production de suies est réduite.

Pour tirer parti au mieux des deux systèmes les motoristes ont proposé d'utiliser un moteur où l'on injecterait le fuel juste avant l'allumage. De cette manière le mélange n'a pas le temps de rendre le champ de richesse uniforme, ce qui permettrait d'obtenir une richesse proche de un au niveau de la bougie à l'instant de l'allumage, bien que la richesse globale du mélange soit pauvre. Le plus simple pour obtenir un mélange non homogène dans toute la chambre consiste à injecter le fuel sous forme liquide toujours dans la tubulure d'admission, mais près de la soupape et quand celle-ci est encore ouverte. De cette manière, du carburant liquide entre dans la chambre de combustion et il permet d'obtenir une certaine inhomogénéité de richesse. Cependant il est difficile de cette manière de contrôler le mélange de façon à garantir une richesse proche de un près de la bougie au moment de l'allumage. Une autre méthode consiste à injecter directement l'essence dans la chambre de combustion comme sur la Figure: 3.7, on parle de moteur à Injection Directe Essence IDE (GDI en anglais, Gasoline Direct Injection). L'entreprise pionnière dans le monde pour la mise au point de ce type de moteur est Mitsubishi Motors. La technologie mise au point est présentée sur son site Internet [79].

Sur les images on peut voir comment dans la chambre de combustion se déroule la combustion dans un moteur IDE. Comme on a une répartition non homogène de richesse, grâce à l'injection tardive de l'essence dans le cylindre, le problème est de contrôler que la partie du mélange qui est la plus propice à l'inflammation, se situe au niveau de la bougie lorsque l'étincelle se produira. Idéalement il faudrait avoir une richesse maximale égale à un autour de la bougie et un milieu pauvre ailleurs de manière à baisser la température de fin de combustion, on parle de charge stratifiée. Cela nécessite de contrôler au mieux l'écoulement dans le cylindre. Pour cela l'alimentation de l'air lors de l'admission est organisée de façon à créer un tourbillon (tumble). Ce tourbillon sert à propulser le nuage de gouttelettes de fuel vers la bougie, pour cela il doit tourner dans le sens inverse de celui créé par les tubulures d'admission habituelle, Figure: 3.8. La forme du piston est creusée pour guider l'écoulement vers la bougie, Figure: 3.9. Le fuel est ensuite injecté, grâce au mouvement de l'air, le jet se déstabilise rapidement pour former un nuage de fines gouttelettes qui se dirige vers la bougie, Figure: 3.10. L'étincelle se produit et la flamme se propage rapidement dans le bol du piston

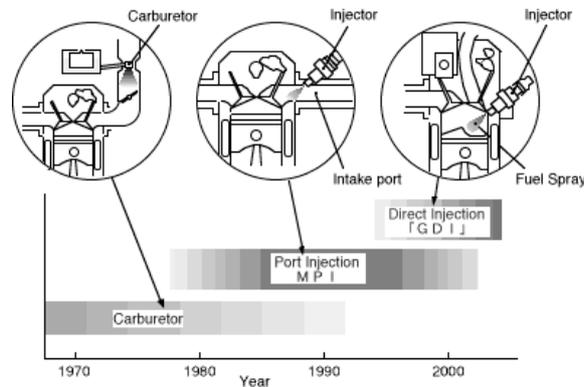


FIG. 3.7 – Evolution de l'introduction du carburant dans les moteurs à essence, d'après [79]

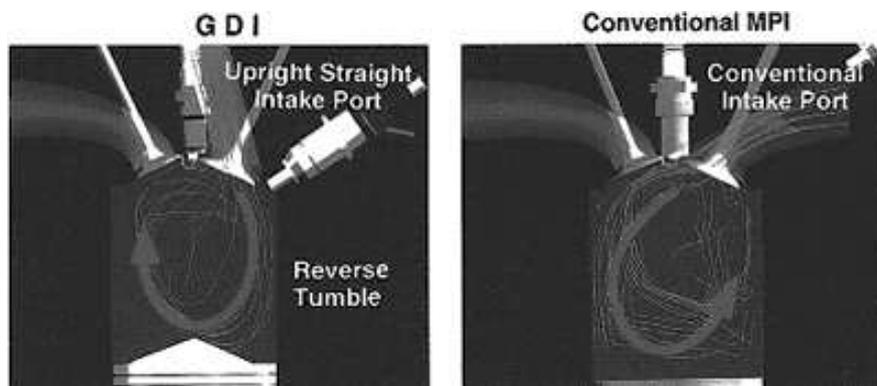


FIG. 3.8 – Inversion du "tumble" pour contrôler le mélange dans un moteur IDE, d'après [79]

ou la richesse est proche de un, puis dans la deuxième partie de la chambre où le milieu est pauvre, Figure: 3.11. La combustion s'est donc passée en milieu globalement plus pauvre ce qui permet de réduire la température maximale et donc en limitant les pertes thermiques d'obtenir un meilleur rendement.

Dans ce type de moteur la non-homogénéité de richesse globale que l'on cherche à obtenir, combinée à la turbulence, va provoquer des fluctuations de richesse aussi à petite échelle. On se retrouve alors dans un cas intermédiaire entre les flammes de diffusion et les flammes prémélangées. De plus la présence des gouttes peut aussi entraîner comme pour le moteur Diesel la présence de zones trop riches et la production de suies. Une des grandes difficultés dans ce moteur consiste à réaliser l'allumage. Par exemple si la poche de richesse un passe à côté de la bougie, la flamme créée par l'étincelle risque de s'éteindre. Quand il reste des gouttes non évaporées près de la bougie pour une richesse globale égale à un, l'allumage provoque une expansion rapide des gaz due au dégagement de chaleur de l'étincelle, ce qui va projeter l'air au loin et les gouttes de fuel qui ont une inertie plus grande risquent de rester sur place. Finalement on obtiendra une richesse globale autour de la bougie supérieure à un. Le milieu étant riche on risque de former des suies. D'un autre côté si les gouttes sont trop petites elles peuvent être projetées loin de la bougie. Il reste alors autour de la bougie une poche de mélange pauvre qui ne permet pas la propagation de la flamme et qui conduit à

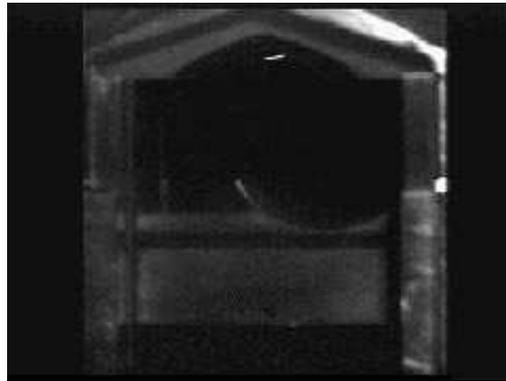


FIG. 3.9 – *Chambre de combustion d'un moteur IDE, d'après [79]*

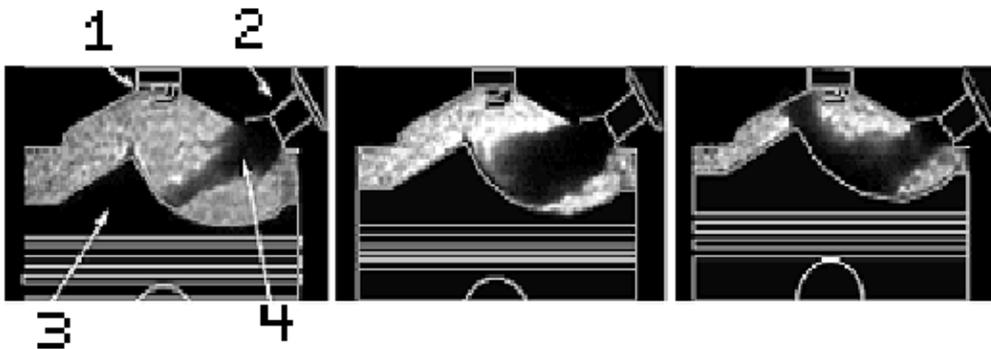


FIG. 3.10 – *Comportement du spray de carburant visualisé par ombroscopie dans une chambre de combustion d'un moteur IDE (1- bougie, 2- injecteur, 3- piston, 4- spray de combustible), d'après [79]. Les images sont de gauche à droite respectivement 40, 30 et 20 degrés vilebrequin avant le point mort haut.*

l'extinction. Donc quand il y a des gouttes à l'endroit de l'allumage la probabilité d'allumage dépend de leur rayon [56].

Il apparaît donc que les flammes qui prennent place dans les moteurs modernes sont l'aboutissement de plusieurs phénomènes physiques. Il faut mélanger le carburant avec l'air, ce qui comprend l'atomisation du liquide, son évaporation et enfin son mélange proprement dit. Ensuite, il faut réaliser la combustion de ce mélange, ce qui comprend l'allumage et la combustion proprement dite à travers différents types de flammes qui vont des flammes prémélangées aux flammes de diffusion. Dans tous les cas le mélange est un point crucial et pour augmenter son intensité on se place toujours en milieu turbulent, ce qui complique encore la physique. Afin de modéliser tous ces problèmes il est nécessaire de comprendre ces flammes dans des configurations de laboratoire plus simples que les chambres de combustion des moteurs.

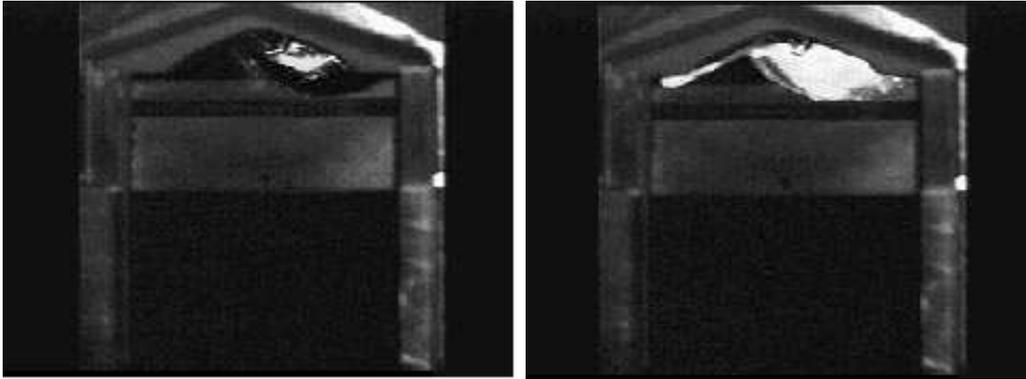


FIG. 3.11 – *Evolution de la flamme de la zone riche, à droite, vers la zone pauvre à gauche dans une chambre de combustion d'un moteur IDE, d'après [79]*

3.2 Description de la combustion des brouillards de gouttes combustibles

La présence d'une phase liquide ajoute de nouveaux phénomènes physiques en plus de la combustion. Nous allons essayer de décrire de façon simplifiée les interactions qui ont lieu entre la flamme et le liquide. Nous exposerons ensuite quelques comportements de flammes diphasiques, de prémélange et de diffusion, observées expérimentalement.

3.2.1 Structure des différents types de flammes

L'approche théorique classique consiste à classer les flammes en deux catégories distinctes : les flammes de prémélange et les flammes de diffusion. Dans les premières, le fuel et l'oxydant sont mélangés avant que la combustion n'ait lieu, dans les secondes, la combustion a lieu en même temps que le mélange. Ce sont deux cas limites idéaux et généralement la combustion qui se déroule dans les installations réelles contient les deux types de flammes à la fois. Pour pouvoir analyser séparément les différents types de combustion nous considérerons le cas idéal où le liquide, nous supposons que c'est le combustible, sera sous la forme de gouttelettes sphériques ayant toutes la même taille et réparties de façon quasiment homogène dans l'espace. Ceci permet de découpler de la combustion les problèmes d'atomisation et de dispersion du liquide dans les gaz.

La classification habituelle flamme de diffusion, flamme de prémélange ne s'étend pas de façon directe aux flammes diphasiques. Par exemple l'existence de flamme de prémélange, au sens de la définition donnée ci-dessus, ne semble plus pouvoir s'appliquer. En effet, la présence de poches de combustible sous forme liquide impose qu'il existe du fuel non prémélangé au moment de la combustion. Les flammes dans les brouillards de combustible sont aussi caractérisées par le niveau d'interaction qui existe entre les gouttes. Les gouttes peuvent brûler individuellement, si la flamme peut pénétrer le brouillard, ou en groupe dans le cas contraire. Nous utiliserons la notion de richesse pour distinguer les flammes de prémélange des flammes de diffusion. Nous tiendrons compte aussi des effets dus aux interactions qui existent entre les gouttes.

La richesse Φ est le rapport de masse de fuel sur la masse d'air du mélange divisé par le

rapport de la masse de fuel sur la masse d'air qu'il y aurait à la stœchiométrie:

$$\Phi = \frac{Y_f}{\frac{Y_{O_2}}{Y_f^{sto}}}. \quad (3.4)$$

La flamme prémélangée gazeuse prend place dans un milieu qui est caractérisé par une richesse Φ constante partout. Devant la flamme le milieu est composé de gaz frais, derrière la flamme le milieu est aussi brûlé qu'il peut l'être pour la richesse Φ donnée. Cette définition ne pose pas de problème pour un milieu gazeux, par contre en milieu diphasique il faut préciser la définition de la fraction massique de fuel. Si l'on ne compte que le fuel sous forme gazeuse, on a Y_f^g qui correspond à la richesse dans les gaz Φ_g et si l'on compte aussi le fuel liquide en plus du fuel gazeux, on obtient Y_f^t qui donne la richesse totale Φ_t . Parmi les approches possibles pour décrire la combustion de brouillard nous utiliserons celle développée par Borghi et al [14][10].

On peut appeler flamme de brouillard prémélangé une flamme dans un milieu où Φ_t est constant partout, quoique Φ_g ne le soit pas à petite échelle. Par contre une flamme de diffusion de brouillard sera celle où Φ_t varie de façon monotone dans la flamme. Dans certains cas, une flamme peut se propager dans un brouillard prémélangé. La flamme ne se propage jamais dans une flamme de diffusion de brouillard. Considérons d'abord le premier cas.

3.2.2 Flamme de brouillard prémélangé

Il y a deux problèmes différents dans ce type de flamme. Il faut savoir si les gouttes vont avoir le temps de s'évaporer complètement avant de traverser la flamme. Si c'est le cas nous obtiendrons une flamme semblable aux flammes gazeuses de prémélange, Figure: 3.12. Si ce

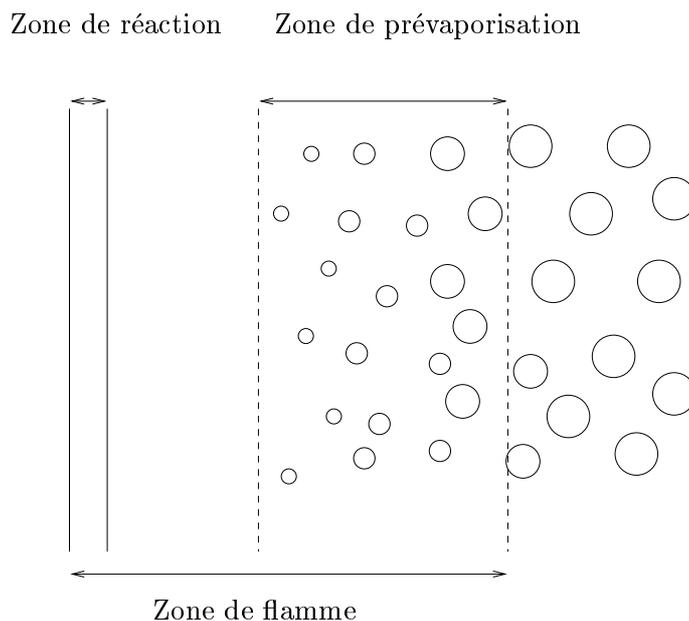


FIG. 3.12 – Structure d'une flamme de prémélange diphasique avec préévaporation

n'est pas le cas, une certaine quantité de gouttes va traverser la flamme il faut alors décrire le type de combustion qu'elles vont subir.

Quand les gouttes ne traversent pas la flamme elles s'évaporent au fur et à mesure qu'elles se rapprochent du front de flamme dans une sorte de zone de préchauffage étendue par rapport au cas purement gazeux. Les vapeurs de combustible ont alors plus ou moins le temps de se mélanger avant d'entrer dans la zone de réaction. Il se peut qu'il reste des fluctuations de richesse qui perturberont le front de flamme, mais il n'y aura pas de goutte liquide après le front de flamme.

Pour déterminer si les gouttes s'évaporent complètement ou non avant le front de flamme, on peut par exemple considérer un temps d'évaporation de la goutte τ_{vap} , qui est le temps que met la goutte pour s'évaporer complètement. Le temps de transit de la goutte depuis la zone de préchauffage jusqu'à la fin de la zone de réaction peut-être estimé par $\tau_c = \frac{e_l}{S_l}$, où e_l est l'épaisseur de la flamme laminaire et S_l est la vitesse normale de propagation de la flamme. On trouve finalement après quelques calculs [10] que le rapport du diamètre des gouttes sur l'épaisseur de flamme laminaire doit être, pour que les gouttes puissent s'évaporer complètement avant la flamme, tel que:

$$\frac{d_g^{initial}}{e_l} < \left(8 \frac{\rho_{gaz}}{\rho_{liquid}} \ln(1+B) \right)^{0.5}, \quad (3.5)$$

où B est le paramètre de Spalding, voir [5.1.1]. On peut aussi se demander si l'inflammation de la goutte est possible avant que son évaporation soit totale [64]. On peut encore supposer que puisqu'un côté de la goutte est du côté du front de flamme, c'est lui qui va s'enflammer en premier. Alors autour de la goutte progressera une flamme triple. Elle progressera le long de l'isosurface correspondant à une richesse unitaire avec une vitesse proche de la vitesse de flamme laminaire prémélangée à richesse un. Le temps nécessaire à l'allumage complet de la goutte est le temps que met cette flamme triple pour encercler la goutte, il sera donc de l'ordre de $\tau_{allumage} = \frac{d_g^{initial}}{S_l}$. Pour que les gouttes se soient évaporées avant de traverser la flamme il faut que ce temps d'allumage soit supérieur au temps de transit. On trouve alors, comme dans tous les cas précédents, que la condition pour avoir une flamme où les gouttes sont complètement vaporisées est que la taille des gouttes doit être inférieure à un certain nombre de fois l'épaisseur de flamme laminaire S_l .

Dans le cas contraire, il nous faut préciser maintenant si la combustion des gouttes qui ont traversé la flamme, prend place autour d'une ou un groupe de gouttes. C'est la deuxième caractéristique à prendre en compte pour les flammes diphasiques. Si l'on considère un spray de combustible assez dense, on ne peut plus négliger l'interaction des gouttes entre elles, que ce soit pour la vaporisation ou pour la combustion. Donc, pour caractériser un spray en plus du rayon des gouttes il faut considérer un autre paramètre qui décrit l'interaction des gouttes, on utilise généralement l'espacement qu'il y a entre les centres des gouttes. Supposer que les gouttes dans un spray sont toutes exactement à la même distance les unes des autres est sans doute trop idéal. On considère plutôt que cette distance varie autour d'une distance moyenne l . Cette moyenne peut être estimée si l'on connaît le nombre de gouttes n_d par unité de volume: $l = n_d^{-\frac{1}{3}}$. De manière générale notons que le spray est toujours caractérisé par au moins deux paramètres indépendants qui sont une combinaison des paramètres suivants: le rayon des gouttes, la fraction massique de liquide, le nombre de gouttes par unité de volume et distance inter-gouttes.

Il y a classiquement deux façons pour décrire l'influence de l'espacement entre les gouttes, elles reposent chacune sur un nombre sans dimension:

La combustion de groupe [24, 23]:

Il faut d'abord que l'on puisse définir des groupes de gouttes parmi les gouttes du spray afin de connaître le nombre total de gouttes par groupe. Il se peut par exemple que l'ensemble de toutes les gouttes forme un groupe unique ce peut être le cas d'un nuage de gouttes ou d'un jet de gouttes. Cette première analyse est basée sur des groupes de gouttes car la configuration étudiée initialement, était un nuage sphérique de gouttes allumé par l'extérieur [23, 29]. Cependant, même si le spray n'est pas initialement sous forme de groupe de gouttes, il est possible que des groupes se forment lors de la combustion [2]. Dans cette étude, Akamatsu et al expérimentent la combustion d'un jet de fuel liquide dans de l'air. Ils mesurent en continu la lumière émise par diffusion de Mie des gouttes qui passent dans un petit volume de contrôle. Dans le cas non-réactif le signal est oscillant mais continu. Dans le cas réactif le signal s'interrompt par moment, ce qui prouve qu'il y a des zones où il n'y a plus de gouttes. Puisque ces trous dans le champ des gouttes n'existent que dans le cas réactif, on peut supposer qu'ils sont dus à la disparition des gouttes qui ont été brûlées, [69]. La combustion elle même provoquerait la formation de paquets de gouttes en se propageant plus rapidement à certains endroits. Basé sur cette notion de groupe, Chiu en 1977 propose d'utiliser le nombre sans dimension suivant:

$$G = 3 * Le * \left(1 + 0.276 Sc^{\frac{1}{3}} Re^{\frac{1}{2}}\right) n_T^{\frac{2}{3}} \left(\frac{r_d}{l}\right), \quad (3.6)$$

où Le est le nombre de Lewis, Sc est le nombre de Schmidt, Re est le nombre de Reynolds et n_T est le nombre de gouttes dans le groupe.

Ce nombre permet alors de définir différents régimes de combustion pour des nuages de gouttes [4]:

- $G < 0.01$: Chaque goutte brûle de façon isolée;
- $0.01 < G < 0.1$: Les flammes autour de chaque goutte commencent à interagir mais ne se rejoignent toujours pas;
- $0.1 < G < 1$: Le centre du groupe s'appauvrit en s'oxydant et une flamme connectée autour des gouttes du centre se met en place à un certain rayon;
- $1 < G < 100$: Pour des G plus grand le rayon de cette flamme augmente jusqu'à sortir du groupe de gouttes;
- $G > 100$: Le nuage de gouttes est si dense qu'il se comporte comme une grosse goutte unique avec une flamme de diffusion qui l'entoure.

Toutefois cette classification ne prend pas en compte de façon claire l'effet de la richesse totale du mélange. Il paraît vraisemblable que l'on puisse passer d'un régime à l'autre sans changer G , mais en augmentant la pression dans la phase gazeuse. Dans ce cas la quantité d'oxygène contenue dans l'espace entre les gouttes sera plus grande, ce qui limitera l'expulsion de la flamme vers l'extérieur du groupe de gouttes. Il se pourrait cependant que la richesse influe sur la formation des groupes initiaux de gouttes et que ce cas soit donc pris en compte à travers n_T .

La percolation [60]

L'autre façon proposée par A.R. Kerstein et C.K. Law est d'utiliser la théorie de la percolation. Le niveau d'interaction est caractérisé par le nombre de gouttes par unité de volume qui est une quantité locale. Cette approche est plus générale puisqu'il n'est pas nécessaire de considérer un groupe de gouttes de dimension bien définie, par exemple représentée par une longueur L , contenant un nombre de gouttes total n_t . Par contre il est possible avec cette nouvelle approche de retrouver certains résultats dans le cas d'un groupe de gouttes bien défini puisque la densité de gouttes est égale, dans ce cas, à $n_d = \frac{n_t}{L^3}$. Le spray est supposé quasiment homogène, de telle manière que l'on puisse calculer l'espace entre les gouttes comme $l = n_d^{-\frac{1}{3}}$. On compare cette distance au rayon de la flamme r_f qu'il y aurait autour d'une goutte similaire brûlant seule, des méthodes pour estimer le rayon de la flamme sont discutées dans [64]. L'effet de la richesse est prise en compte à travers cette valeur. On considère alors le rayon de la flamme adimensionné:

$$s = r_f n_d^{\frac{1}{3}} \quad (3.7)$$

La théorie de la percolation considère un milieu composé d'une part de sphères pleines et d'autre part de l'espace vide entre les sphères. Notons Θ la fraction volumique du milieu plein. On cherche la taille moyenne des volumes formés par des sphères pleines connectées. Si on fait correspondre aux sphères, des sphères de flamme, on obtient alors la taille individuelle moyenne de chaque flamme connectée. La plus petite correspond à une flamme autour de chaque goutte, la plus grande est une flamme infinie c'est-à-dire entièrement connectée. Si on suppose que les sphères sont disposées aléatoirement mais de façon homogène dans l'espace, alors quelque soit le processus aléatoire il existe une valeur critique Θ_c telle que:

- $\Theta < \Theta_c$ alors la flamme moyenne est de dimension finie,
- $\Theta > \Theta_c$ alors on a une flamme connectée partout infinie.

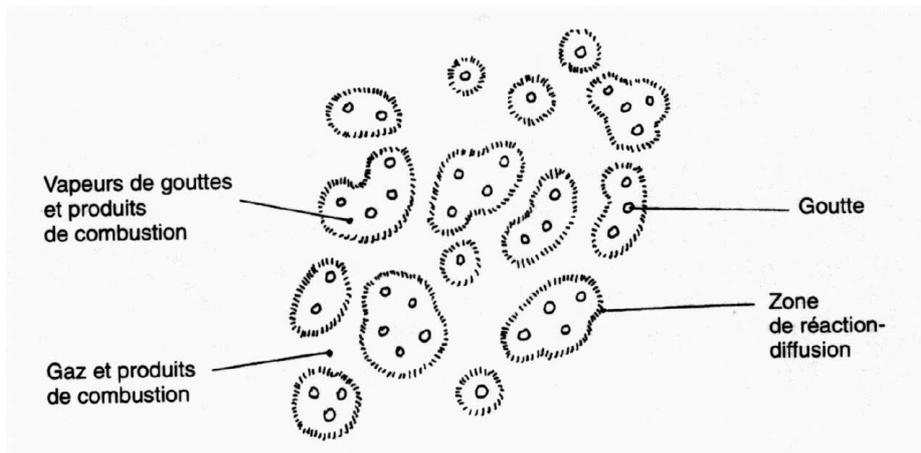


FIG. 3.13 – Combustion de type groupe d'après [10]

Il existe une limite supérieure à Θ après laquelle la flamme ne peut plus être connectée. Cela vient du fait qu'en réalité les sphères de flamme ne sont pas pleines de flammes, celles-ci ne

se situent qu'à la surface. Il vaut mieux considérer des sphères de milieux riches qui entourent les gouttes en opposition au reste du volume composé de milieux pauvres qui ne contiennent pas de gouttes. La surface de flamme est alors la limite qui sépare ces deux volumes. On peut alors faire le même raisonnement que précédemment avec la fraction volumique de milieu riche Θ^{riche} et la fraction volumique de milieu pauvre Θ^{pauvre} auxquelles correspondent un Θ_c^{riche} et un Θ_c^{pauvre} . On obtient alors trois cas:

1. $s < 0.41$, le brouillard est peu dense, le volume du milieu riche qui entoure les gouttes est discontinu ($\Theta^{riche} < \Theta_c^{riche}$) et le volume de milieu pauvre connecté est infini. Dans ce cas la flamme se situe autour des volumes de milieu riche. On a une combustion de type groupe, ce qui comprend le cas où il y a une flamme autour de chaque goutte qui est la limite quand s tend vers zéro. Cette situation est représentée Figure: 3.13.
2. $0.41 < s < 0.73$, le brouillard est moyennement dense, ($\Theta^{riche} > \Theta_c^{riche}$) donc le volume riche connecté est infini et ($\Theta^{pauvre} > \Theta_c^{pauvre}$) le milieu pauvre connecté est donc lui aussi infini. Il s'en suit que la flamme entre les deux milieux est infinie elle aussi, c'est le régime de flamme percolante, Figure: 3.14.

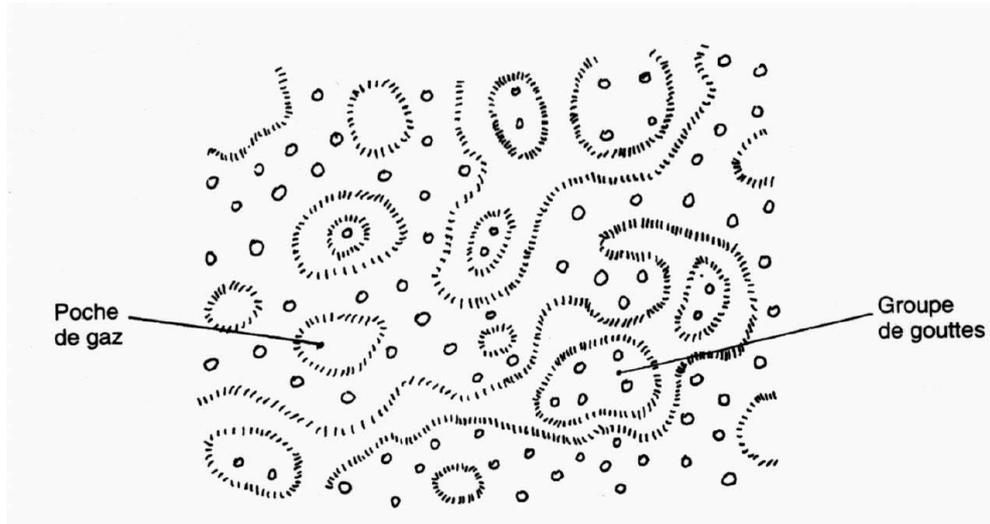


FIG. 3.14 – Combustion de type percolante d'après [10]

3. $0.73 < s$, le brouillard est très dense, ($\Theta^{riche} > \Theta_c^{riche}$) donc le volume riche connecté est infini et ($\Theta^{pauvre} < \Theta_c^{pauvre}$) donc le milieu pauvre discontinu. La flamme est discontinue elle entoure alors des poches de milieu pauvre et elle est entourée d'un milieu infini riche, Figure: 3.15.

Bien-sûr ceci n'est valable que pour un milieu où les gouttes sont réparties de façon aléatoire et homogène, c'est-à-dire sans que l'on puisse y distinguer des groupes. Si le milieu est composé de groupe de gouttes assez gros, on peut appliquer les mêmes idées mais à l'intérieur de chaque groupe.

Remarquons que ces deux méthodes reposent sur des quantités qui évoluent au fur et à mesure que les gouttes s'évaporent. Ainsi la combustion d'un spray peut parfaitement être de



FIG. 3.15 – Combustion de type poche d'après [10]

plusieurs types. Si la richesse totale est proche de un il y aura toujours assez d'oxygène pour que des flammes puissent prendre place entre les gouttes à un moment ou à un autre.

La description précédente suppose que la flamme puisse se glisser entre deux gouttes donc que son épaisseur est inférieure à la distance moyenne entre deux gouttes. Dans le cas contraire le brouillard en combustion n'est plus qu'un milieu avec des réactions distribuées. Les différentes descriptions sont récapitulées dans le diagramme Figure: 3.16.

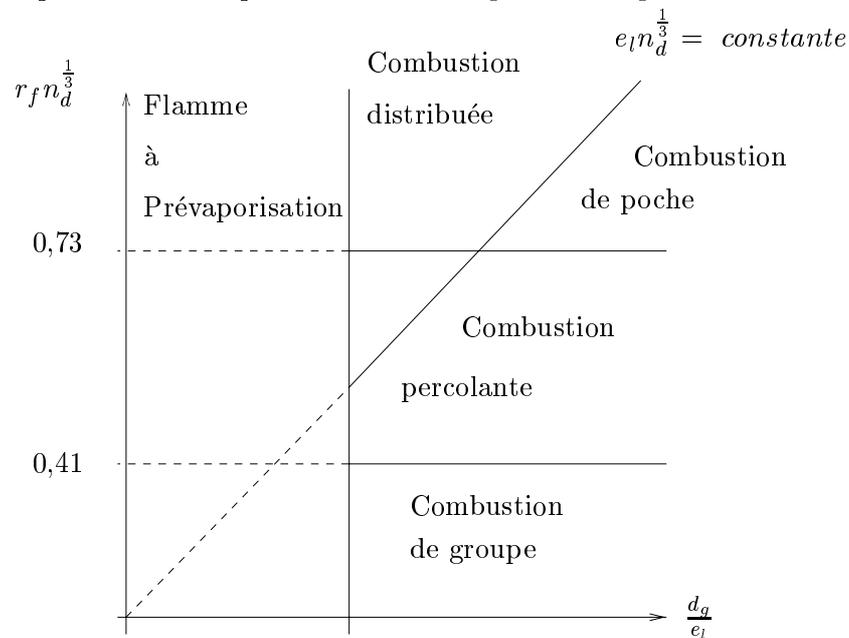


FIG. 3.16 – Diagramme des flammes de prémélange diphasique d'après [10]

3.2.3 Flamme de brouillard de diffusion

Il existe aussi des configurations qui se rapprochent des flammes de diffusion gazeuse. Il suffit de considérer un milieu initialement composé, d'une part de gouttelettes de combustible

entourées d'un gaz qui ne contient pas d'oxydant et d'autre part un milieu gazeux oxydant sans combustible. Sur la frontière, en supposant que les conditions de température le permettent, il y aura une flamme de diffusion classique. De la même façon que dans le cas des flammes de prémélange il faut savoir si les gouttes vont traverser la flamme et, si elles la traversent, comment vont-elles brûler?

Il est toujours possible de définir un temps d'évaporation comme dans le cas des flammes de prémélange. Par contre le temps de transit n'est pas facile à estimer puisqu'il dépend de la vitesse relative de rapprochement des gouttes et de la flamme et de l'épaisseur de préchauffage qui grandit continuellement. Dans le cas où les gouttes sont immobiles il s'agit de la vitesse respective entre les gouttes et l'isosurface correspondant à la stœchiométrie. Si les gouttes traversent la flamme, les raisonnements faits à partir de la densité de goutte par unité de volume et la théorie de la percolation, restent valides.

Les flammes diphasiques de diffusion existent en pratique souvent sous la forme d'un jet liquide de combustible pénétrant une atmosphère oxydante. La flamme qui prend place est semblable en partie à celle qu'il y aurait eu si on avait injecté un jet gazeux de combustible. Les profils de fraction massique ressemblent à ceux d'une flamme de diffusion gazeuse, à condition de considérer la fraction massique de combustible totale Y_f^t . La fraction massique de combustible uniquement gazeux Y_f^g a des profils différents. Notamment le profil axial montre au début une augmentation de Y_f^g due à la vaporisation des gouttes qui n'existe pas dans le cas gazeux. La Figure: 3.17 montre les profils de fraction massique de liquide Y_l , de vapeur Y_v , d'oxydant Y_{O_2} et de température dans ce type de flamme.

L'accrochage d'une flamme diphasique peut se faire de la même façon que dans le cas gazeux par la propagation d'une flamme de prémélange diphasique qui contrebalance l'entraînement des gaz brûlés par l'écoulement. On obtient alors une flamme triple de type diphasique, qui du côté de l'air contient une flamme de prémélange globalement pauvre en oxygène et du côté des gouttes une flamme de prémélange globalement riche.

Finalement les descriptions ci-dessus permettent de prédire les comportements possibles des flammes diphasiques. Cependant les limites définies ne sont que qualitatives, d'autant plus que les flammes réelles sont beaucoup plus compliquées. Notamment le rayon n'est en général pas le même pour toutes les gouttes, ce qui veut dire que par exemple une flamme de prémélange peut avoir une partie de ses gouttes qui traverse le front de flamme et l'autre non. De plus les gouttes sont rarement immobiles dans les gaz et c'est une différence fondamentale qui existe avec les flammes gazeuses, il peut exister un décalage de vitesse entre le gaz et les gouttes. Cela change par exemple l'évaluation du temps de transit dans la flamme en effet ce n'est pas simplement la vitesse de propagation de la flamme qui compte il faut y ajouter la vitesse de déplacement des gouttes par rapport au gaz.

3.2.4 Observation expérimentale de quelques flammes diphasiques

Dans cette partie nous allons décrire des flammes observées durant cette thèse lors d'un séjour en Angleterre. Le travail s'est déroulé dans le laboratoire de 'Mechanical Engineering' de l'université de Leeds. Dans le cadre d'un projet européen Franck Atzler, durant sa thèse [5] et sous la direction de Malcom Lawes, a construit un dispositif expérimental dédié à l'observation des flammes diphasiques Figure: 3.18. La particularité de ce dispositif est d'obtenir des flammes se propageant dans un champ homogène de gouttelettes immobiles. Ceci afin de mesurer des caractéristiques de la flamme qui ne soient pas perturbées par l'aérodynamique des gouttes. Pour cela le principe de la chambre de Wilson [111] a été utilisé. Il s'agit de

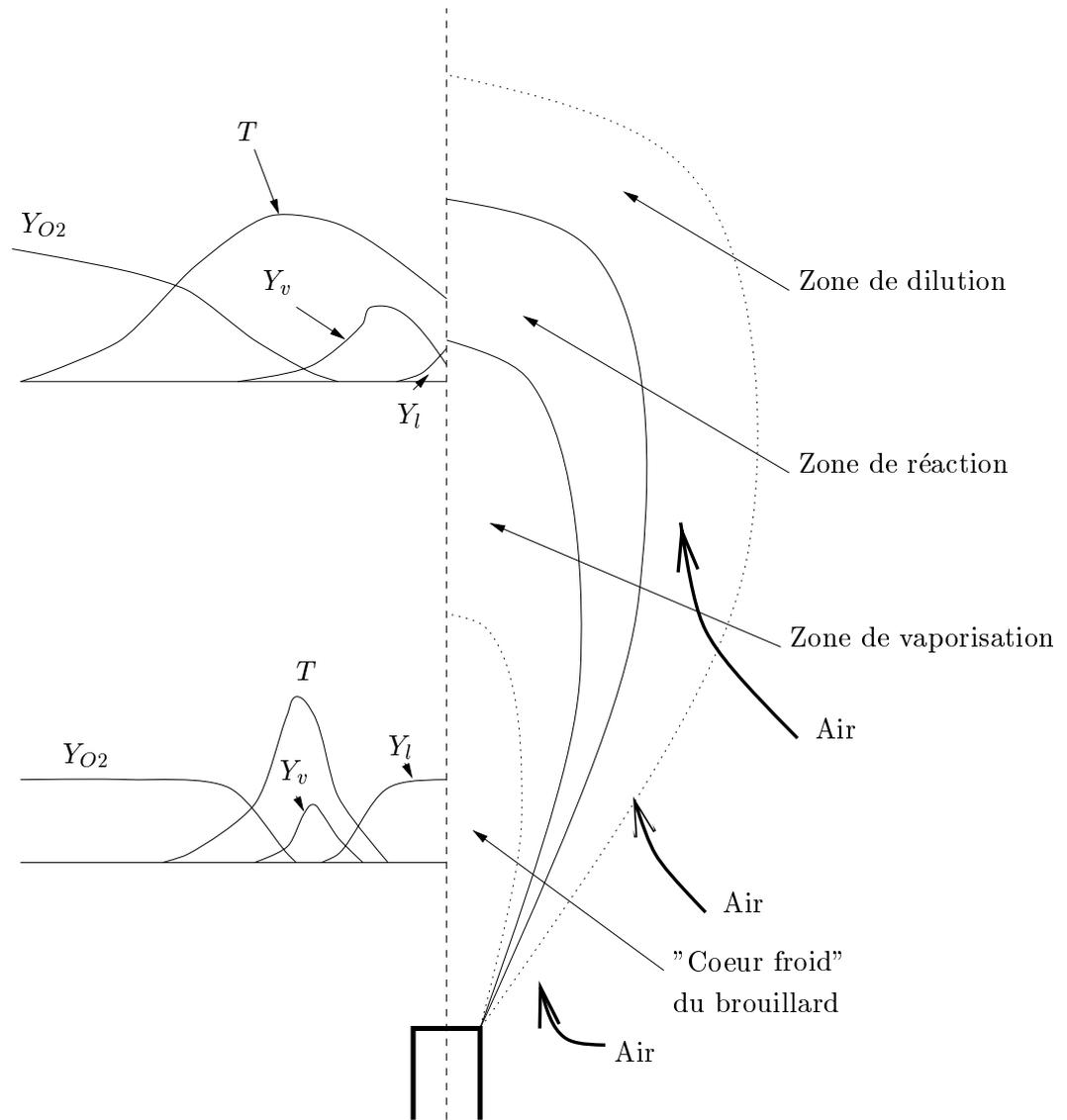


FIG. 3.17 – Profils de richesse dans une flamme diphasique de diffusion

créer le spray liquide à partir du combustible sous forme gazeuse. Pour cela on place un prémélange de richesse homogène dans la chambre de combustion, celui-ci est alors refroidi en faisant chuter la pression et la température jusqu'à ce que le combustible se condense en un nuage de gouttelettes. On obtient ainsi un spray homogène sans les perturbations qui auraient été induites lors de l'injection du liquide et de son atomisation avec un injecteur classique. C'est le cas d'un brouillard prémélangé avec une certaine proportion de fuel gazeux déjà prémélangé.

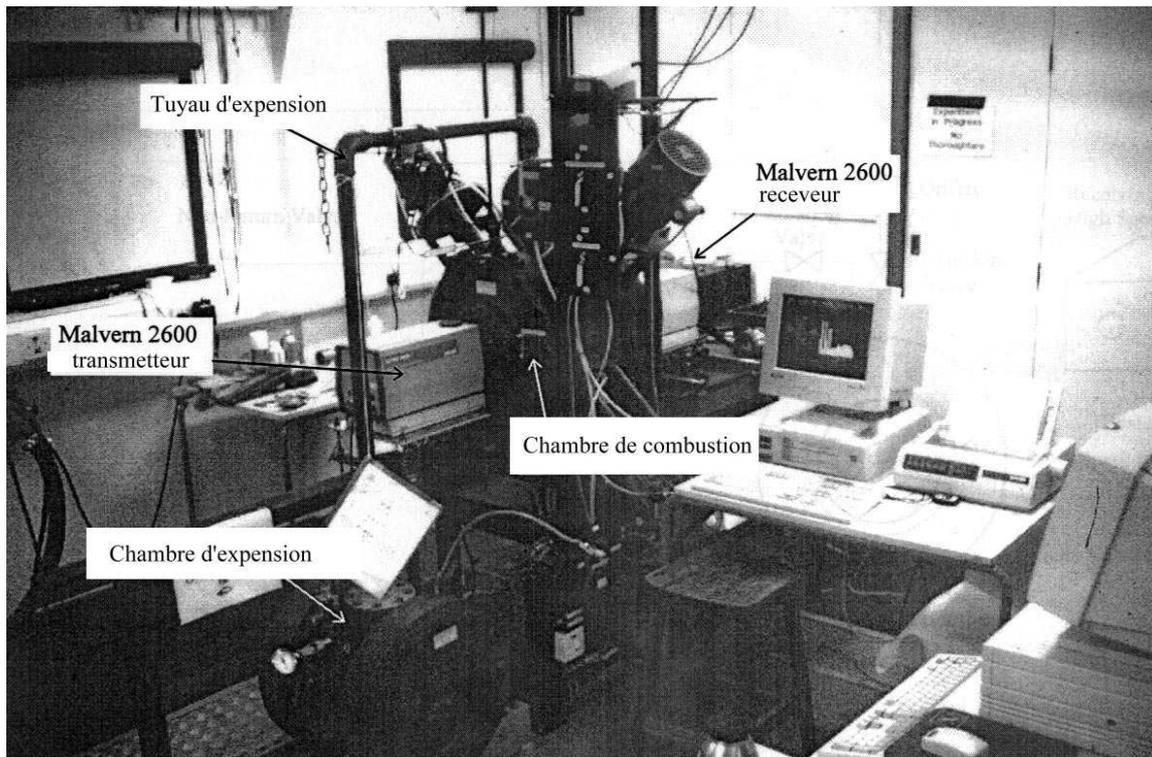


FIG. 3.18 – Photo du dispositif expérimental

Description de l'expérience

La chambre de combustion provient des premières expériences menées à Leeds pour la combustion prémélangée gazeuse [65]. Elle se compose d'un volume fermé cylindrique de 305 mm de diamètre et de 305 mm de longueur, soit un volume de 23.2 litres. Deux hublots de 150 mm de diamètre et de 39 mm d'épaisseur situés de part et d'autre de la chambre sur l'axe permettent d'observer la flamme à l'aide de technique telle que l'ombroscopie. Le dispositif de chauffage a été particulièrement étudié pour éviter toutes inhomogénéités dans le champ de température, celles-ci se seraient reportées pendant la condensation sur le champ de gouttes. L'allumage de la flamme est assuré par une bougie placée au centre de la bombe et maintenue par un bras métallique. Sur le côté un petit hublot peut permettre le passage d'une nappe laser qui pourra alors être observée perpendiculairement par les hublots principaux. D'autre part quatre ventilateurs pouvant servir à créer une turbulence homogène isotrope au centre de la bombe sont disposés à l'intérieur du cylindre.

La dépressurisation de la chambre de combustion pour obtenir le spray est réalisée grâce à une autre chambre d'un volume de 28 litres, reliée à la chambre principale par un tube fermé d'une soupape. La technique consiste à faire le vide dans cette chambre auxiliaire puis, au moment où l'on veut former le spray, on ouvre la soupape qui relie les deux chambres. Le prémélange contenu dans la chambre principale s'expand rapidement vers la chambre auxiliaire ce qui provoque la chute de pression, de température et donc la condensation du spray. Le schéma de cette installation expérimentale est représenté Figure: 3.19.

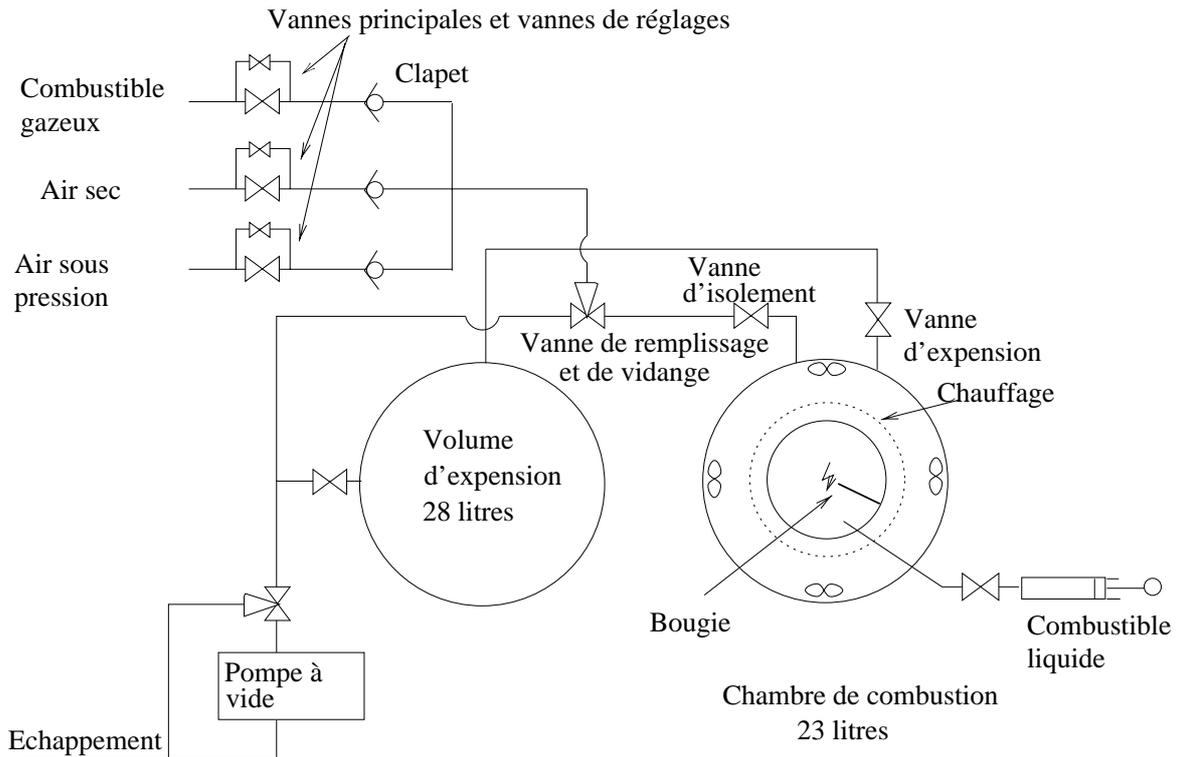


FIG. 3.19 – Schéma du dispositif expérimental pour la création et la combustion d'un spray prémélangé.

Pour former le prémélange gazeux un orifice permet d'introduire une quantité de fuel liquide avec une seringue. On fait le vide dans la bombe principale, le liquide est ainsi aspiré dans la bombe. On peut contrôler visuellement son évaporation. Quand il ne reste plus de liquide on introduit une quantité d'air sec dans la bombe principale. Durant tout ce processus les ventilateurs sont allumés ce qui assure un bon mélange de tous les composants gazeux. Le milieu est alors porté précisément à la température et la pression voulues, les ventilateurs sont ensuite arrêtés. Le début de l'expansion des gaz est déclenché par l'ouverture de la soupape entre les deux bombes. Pour que l'ouverture soit quasiment instantanée, celle-ci est commandée par un système pneumatique. Son fonctionnement déclenche un signal électronique qui sert d'initialisation au processus d'allumage. L'ouverture de la soupape est aussi l'instant de référence pour la mesure de l'évolution de la température et de la pression dans le milieu en fonction du temps.

Les propriétés du spray ont été obtenues d'une part par des mesures de tailles de particules

avec l'équipement Malvern et d'autre part par des calculs supposant que l'on est à l'équilibre thermodynamique. Le principe de la mesure des tailles de gouttes est décrite en détail dans [58] et [98]. Quand un faisceau lumineux rencontre une particule, la lumière est réfractée et réfléchiée dans toutes les directions. La distribution spatiale de la lumière est une fonction de la taille des particules et de la longueur d'onde du rayon incident. Le système de mesure est constitué d'un faisceau laser qui traverse la zone contenant les particules. Le faisceau passe ensuite à travers une lentille qui fait converger tous les rayons lumineux non dispersés au centre d'un champ de détecteur concentrique Figure: 3.20. La mesure de l'intensité lumineuse à cet endroit permet d'estimer la concentration globale de particules. La distribution de l'intensité lumineuse suivant les rayons est reliée à la distribution des rayons.

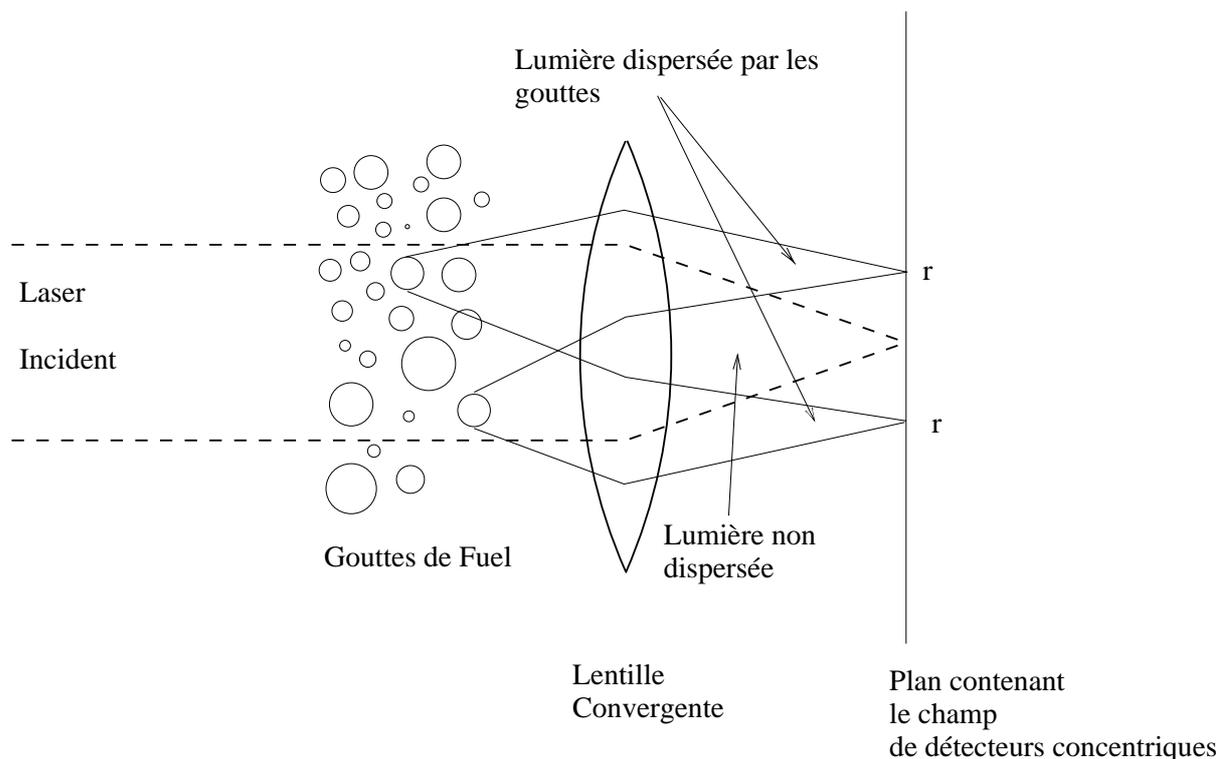


FIG. 3.20 – Schéma du dispositif de mesure de taille de goutte Malvern

Le brouillard de combustible est finalement allumé au centre de la bombe par une bougie. Il se développe alors une flamme sphérique. Celle-ci est étudiée à l'aide d'une technique d'ombroscopie et d'une technique de visualisation par tranche laser:

– Imagerie rapide à base d'ombroscopie:

La vitesse de la flamme est étudiée en utilisant les gradients d'indice de réfraction du milieu provoqué par les changements de masse volumique. Cette technique est pratiquée depuis longtemps notamment à Leeds, voir par exemple [65] et [15]. On utilise un laser néon-hélium de 20 milliwatts de longueur d'onde 632 nanomètres comme source d'éclairage. Le faisceau laser est alors étendu à un rayon de 150 millimètres par un objectif Olympus A40, puis redressé par une lentille de 150 millimètres ayant une focale

de 1000 millimètres. Le rayon laser parallèle ainsi formé passe à travers la chambre de combustion. Il est ensuite reconvergé par une lentille identique sur la caméra rapide. Celle-ci est un modèle Hitachi hm16 avec un objectif Nikkor 50 millimètres/1:2. Le film utilisé est un film de 16 millimètres noir et blanc Ilford HP4 ou HP5. Lors de l'analyse ce film est projeté sur un écran où le taux d'agrandissement de l'image est environ 40. La technique de l'ombroscopie fournit la projection du pourtour de la flamme grâce aux gradients de densité qui change l'indice de réfraction à l'endroit de la flamme. Cette vue d'ensemble permet de mesurer l'accroissement du rayon de la flamme et donc la vitesse de flamme. Cependant la projection de la forme 3D de la flamme sur un plan 2D entraîne la perte de certains détails de sa géométrie. Pour améliorer ce point on a donc utilisé une technique de visualisation par tranche laser.

– Visualisation par tranche laser:

Un plan laser est construit à partir d'un laser à vapeur de cuivre (Oxford Lasers Ltd., model LS20-50). Ce laser a une longueur d'onde de 510.6 nanomètres, il est de couleur verte. On utilise une lentille bi-convexe de focale 1000 millimètres et une lentille cylindrique de focale 1000 millimètres pour étendre le laser de diamètre initial de 25 millimètres en un plan de lumière qui traverse la bombe Figure: 3.21. L'épaisseur de

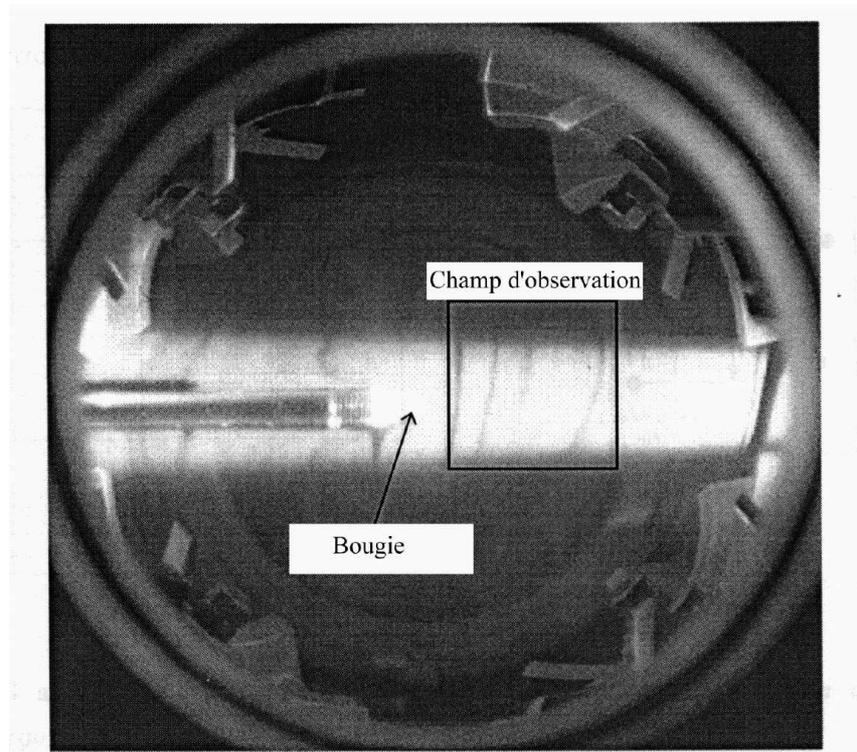


FIG. 3.21 – Photo de l'intérieur de la bombe éclairée par le plan laser.

la tranche laser est comprise entre 0.3 et 0.5 millimètres. Cette épaisseur est assez fine par rapport aux dimensions de la flamme pour assimiler la tranche laser à un plan 2D. Pour garder une intensité lumineuse suffisante et à cause de l'étroitesse de l'ouverture

qui permet au faisceau de rentrer dans la bombe, la largeur de la surface utile pour l'observation de la flamme est de 45 millimètres. La lumière réfléchiée par les gouttes qui traversent la nappe laser, est observée orthogonalement par les hublots principaux de la bombe. Cette image est enregistrée durant la combustion à l'aide d'une caméra tournante rapide 'drum', cordin 321, équipée d'un objectif UV-Nikkor 105mm/1:4.5 . La caméra à l'aide d'un miroir fixe projette l'image sur le négatif placé au fond d'un tambour tournant à haute vitesse. Le laser n'émet pas une lumière continue, mais des pulses d'environ 2 millijoules d'une durée d'environ 15 nanosecondes. La fréquence des pulses est de 2000 Hertz, ce qui permet d'enregistrer 43 images sur le film 35 millimètres KODAK Tmax 3200 ASA noir et blanc. Ce qui correspond à une durée totale de la mesure de 21.5 millisecondes alors que le temps mis par la flamme pour atteindre le bord de la bombe est d'environ 30 à 40 millisecondes. Le déclenchement de la mesure se situe quelques millisecondes après l'allumage, la propagation de la flamme ne pouvant être enregistrée qu'en partie.

Résultats expérimentaux

Plusieurs expansions ont été réalisées pour chaque cas étudiés montrant de légères fluctuations dans les mesures de température et de pression, la mesure retenue est la moyenne de toutes les mesures pour chaque cas. Dans le cas où la température initiale dans la bombe est $T_i = 300K$ et la pression initiale est $P_i = 2$ bars, on obtient la courbe de température représentée Figure: 3.22 pour différentes richesses. La température commence par chuter régulièrement jusqu'à 2.7ms, puis montre certaines oscillations et remonte petit à petit. La remontée de la température s'explique par l'échange de chaleur qu'il y a entre les parois chaudes de la bombe et l'air froid. Les oscillations que l'on voit pourraient être dues à des instabilités de type Rayleigh-Benard. Pour éviter ces perturbations l'allumage devra se faire avant le début des oscillations. La pression et la température permettent de calculer la pression de vapeur saturante dans le milieu en supposant que l'équilibre thermodynamique est toujours atteint. Ce qui permet, sachant la richesse globale, de déterminer la fraction massique de liquide dans la bombe. Ces résultats sont comparés avec la fraction volumique de liquide mesurée directement en utilisant le Malvern. La comparaison des deux méthodes montre que l'équilibre thermodynamique n'est pas toujours atteint et qu'un retard , peut-être dû au temps nécessaire à la nucléation, doit être pris en compte, voir [5]. D'autre part les distributions de tailles de gouttes mesurées par le Malvern étant assez étroites, voir Figure: 3.23, on peut considérer que les gouttes ont le même rayon. Connaissant la fraction volumique de liquide et la taille des gouttes on a accès à toutes les données nécessaires pour calculer: la fraction massique de vapeur de fuel, la distance entre les gouttes, le nombre de gouttes par unité de volume, etc ...

Cette expérience permet donc d'étudier la propagation d'une flamme dans un brouillard prémélangé pour différentes richesses totales, la richesse en phase gazeuse étant choisie en fonction de l'instant d'allumage. La durée de la combustion totale est de quelques millisecondes, on estime donc que ce laps de temps est négligeable par rapport au temps de variation des conditions initiales est que donc celles-ci sont constantes. Certaines conditions initiales sont couplées, on ne peut pas les choisir indépendamment les unes des autres. Ainsi, telle pression et telle température initiale correspondent pour une richesse totale donnée à une quantité fixe de fuel sous forme liquide. Par exemple il n'est pas possible d'avoir un spray pour des conditions de température et de pression où le fuel est complètement gazeux. Il n'est donc pas possible de comparer directement les vitesses des flammes laminaires gazeuses avec celles

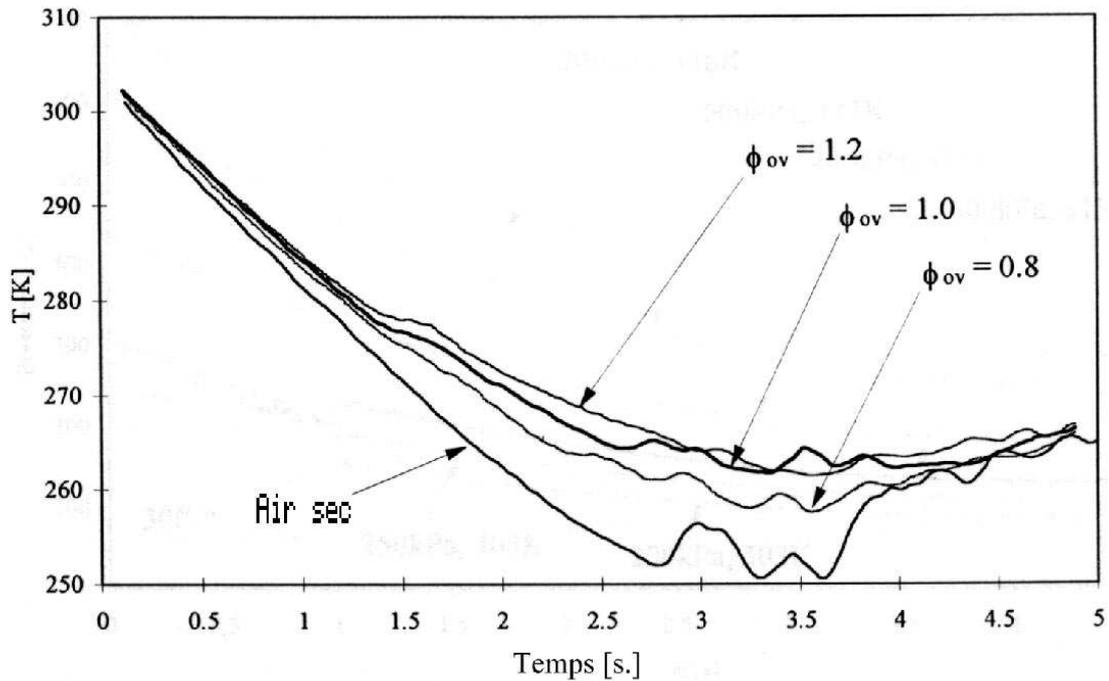


FIG. 3.22 – Evolution de la température au cours de l'expansion pour différentes richesses totales

des flammes laminaires diphasiques.

La figure Figure: 3.24 représente les images obtenues lors de la propagation d'une flamme gazeuse d'iso-octane-air, de richesse $\Phi = 1.0$ à une pression de $p = 1\text{bar}$ et une température $T = 328\text{K}$. On voit nettement le contour de la flamme, sur la droite le support de la bougie. A gauche, deux marques servent de repère de distances, elles sont séparées de 60mm . Ces flammes gazeuses ont fait l'objet d'un important travail à Leeds[15]. Notamment les flammes ont été étudiées en fonction de l'étirement généralisé et du nombre de Markstein. L'étirement, en anglais 'stretch', dans un solide correspond au rapport de la variation d'une longueur divisée par elle-même. Dans le cas sphérique la longueur est remplacée par la surface de la flamme: $A = 4\pi r^2$, ce qui donne la formulation suivante pour le stretch α :

$$\alpha = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} = \frac{2}{r} \frac{dr}{dt} = 2 \frac{S_f}{r}, \quad (3.8)$$

où S_f est la vitesse de flamme.

L'étirement est dit généralisé car la courbure est aussi prise en compte à travers le rayon de la flamme r qui apparait au dénominateur.

Le stretch ainsi défini tend à stabiliser la flamme. Donc quand le rayon de la flamme est petit, l'étirement étant fort, les flammes sont lisses. A des rayons plus grands l'étirement devient plus faible, alors les flammes riches ou à pression élevée se destabilisent laissant apparaître des cellules sur le bord de la flamme, Figure: 3.25. Plus la pression est forte et plus la taille des cellules est petite.

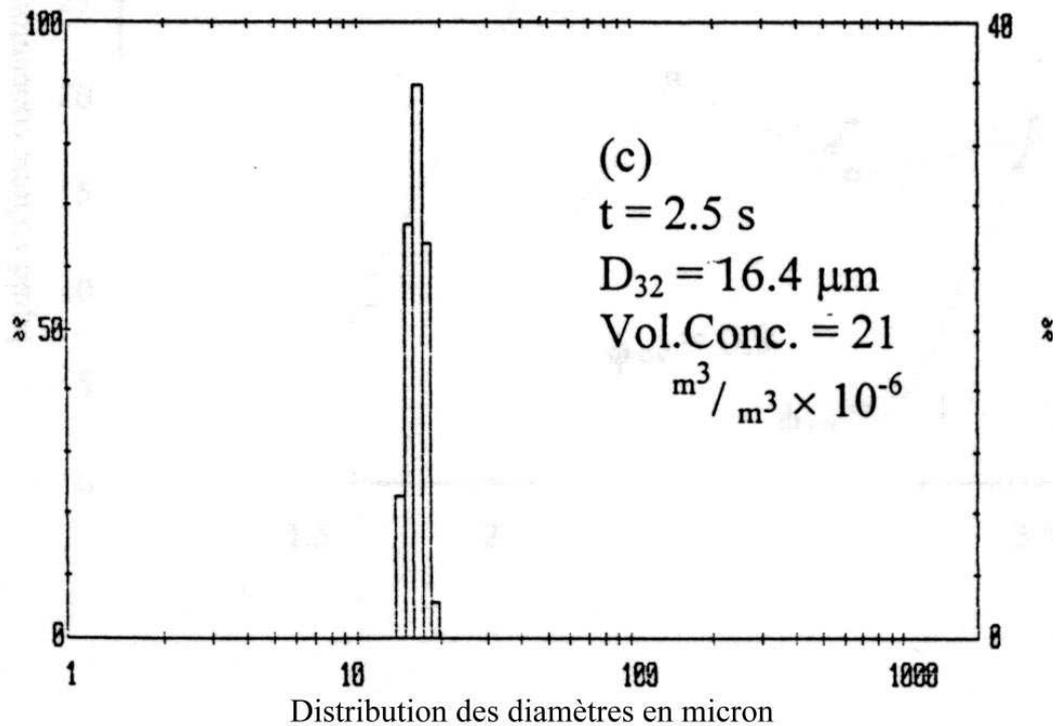


FIG. 3.23 – Exemple de PDF de diamètre des gouttes mesurée avec le Malvern.

Il est apparu que la présence des gouttes, pour des flammes de même richesse totale, favorisent la naissance de perturbations du front de flamme. Le développement de flammes diphasiques est présenté Figure: 3.26 et Figure: 3.27. La modification du front de flamme diffère du cas gazeux où des cellules d'instabilités apparaissaient. Dans le cas gazeux quelques 'crack' traversent la surface de la flamme de part en part, puis d'autres 'crack' apparaissent qui en se croisant forment des cellules de plus en plus petites. Dans le cas du spray le front de flamme est directement perturbé à petites échelles qui sont bien inférieures au diamètre de la flamme. Ces perturbations sont ensuite de plus en plus visibles et généralement de tailles de plus en plus petites. De plus elles apparaissent en blanc sur l'image d'ombroscopie alors que les cellules dans le cas gazeux apparaissent en noir, ceci pourrait être dû à un biais expérimental ou peut-être à l'inversement de la courbure des cellules. Ces différences suggèrent que les perturbations du front de flamme ne sont pas de même nature que les instabilités rencontrées dans le cas gazeux. Il se peut que ce soit la présence des gouttes et des hétérogénéités locales de richesse qui plisse la flamme et non pas son instabilité intrinsèque.

Nous avons essayé de voir grâce au plan laser la forme de ces perturbations Figure: 3.28. Les figures de gauche représentent le champ de gouttelettes au cours du temps. La progression de la flamme est marquée par la disparition des gouttelettes qui s'évaporent. Le champ de gouttelettes semble assez homogène bien qu'une vue d'ensemble laisse entrevoir une taille caractéristique de groupe de gouttelettes. Cette échelle semble être de la même taille que les oscillations du bord de la flamme. Cependant on ne les distingue pas nettement dans le découpage du champ de gouttelettes. De plus il reste une incertitude sur la position de la

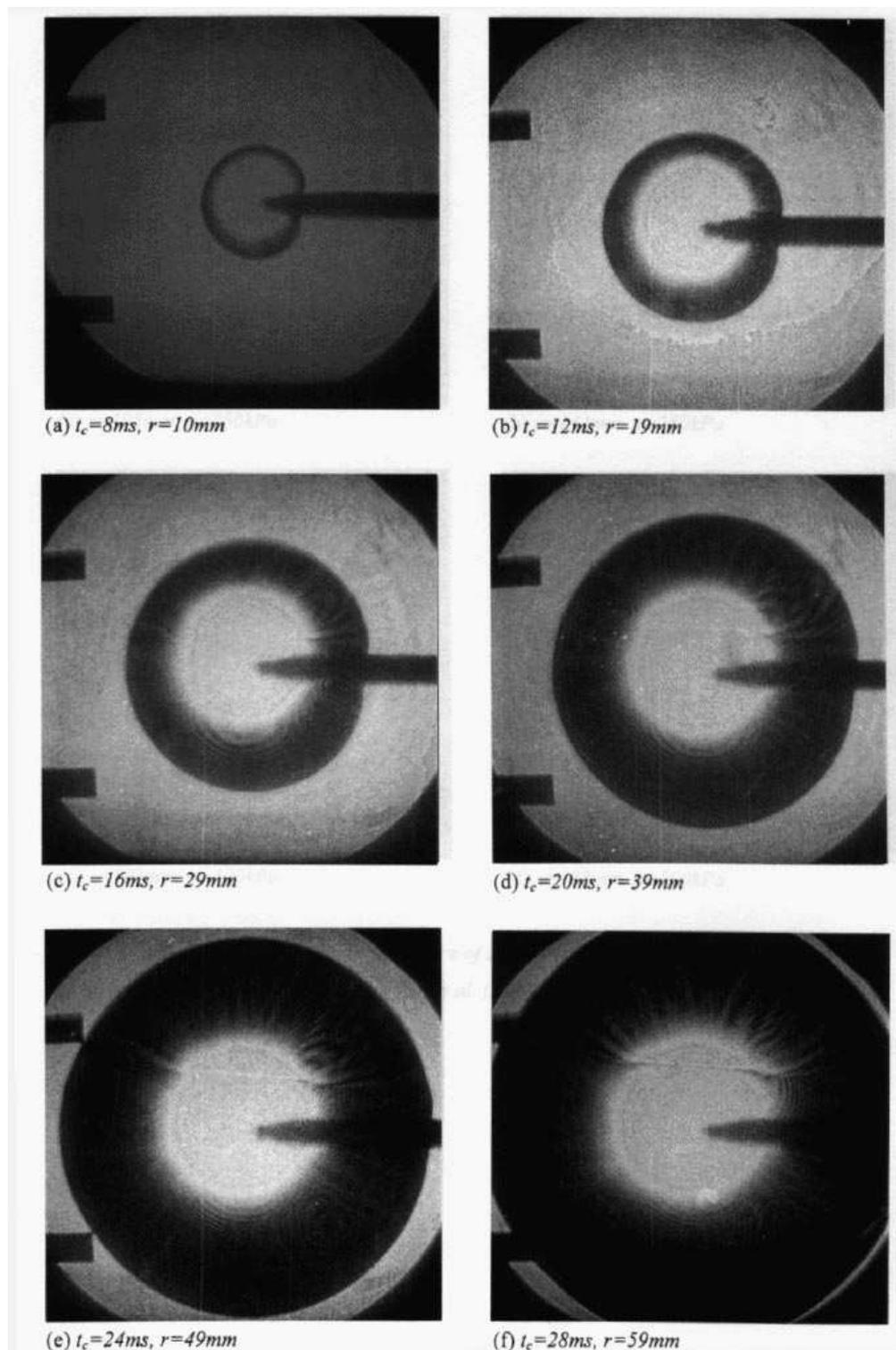


FIG. 3.24 – Evolution d'une flamme sphérique d'iso-octane-air gazeuse, $\Phi = 1$, $p = 1\text{bar}$, $T = 328\text{K}$.

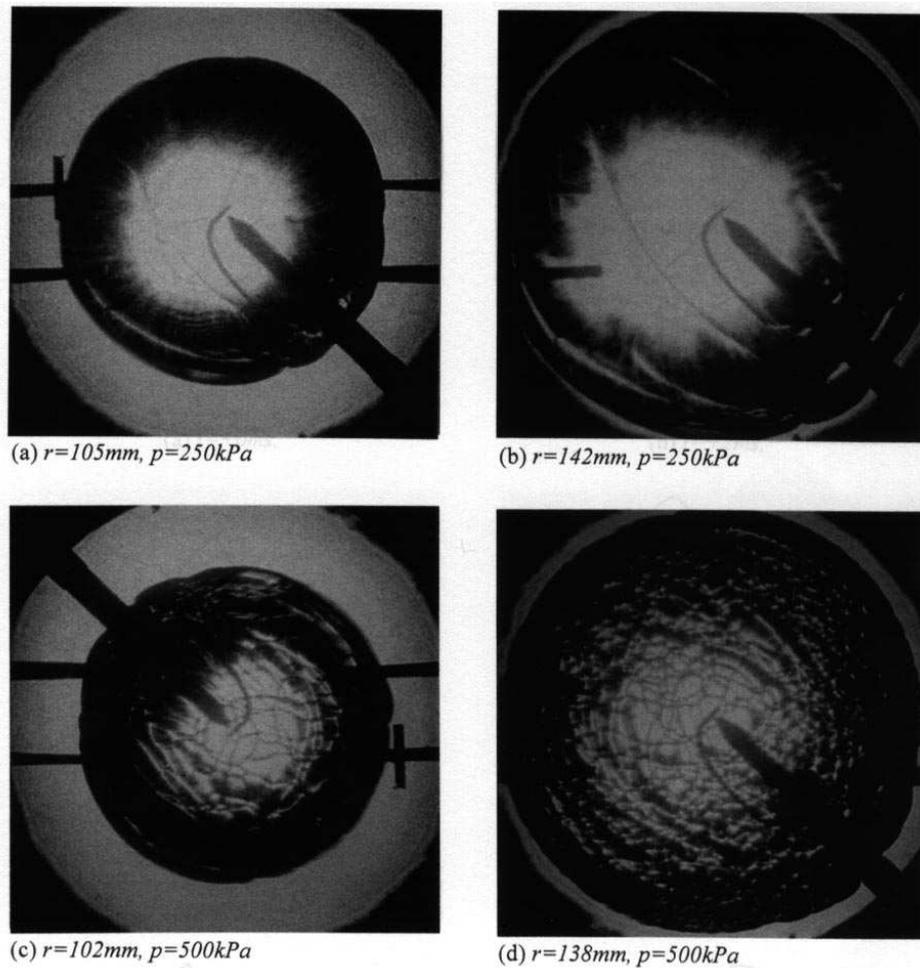


FIG. 3.25 – Flamme gazeuse présentant des cellules d'instabilités, $\Phi = 1$, $p = 5\text{bar}$, $T = 358\text{K}$.

flamme. Si les gouttes s'évaporent avant la flamme, la fin du champ de gouttelettes ne marque pas la zone de réaction mais plutôt la zone de préchauffage. Tout au contraire si les gouttes sont capables de traverser la flamme sans être complètement évaporées, la flamme sera épaissie et le début de la zone de réaction se situera à l'intérieur du champ de gouttes. Pour visualiser le début de la zone de réaction nous avons essayé de marquer celle-ci avec de la fumée de cigarette. Cependant la présence de cette fumée dans le mélange lors de l'expansion favorise la nucléation. Nous avons alors vu un brouillard opaque se former qui ne permettait plus de mesure optique. En n'ajoutant qu'une quantité infime de fumée nous avons pu obtenir les images situées sur la gauche de la Figure: 3.28. Les perturbations y sont plus visibles mais il est probable que les caractéristiques du brouillard sont modifiées.

Les images successives du champ de gouttes ont été traitées avec le logiciel de PIV *VISIFLOW*, (*AEA Technology, 1997*). La technique de PIV est décrite en détail par exemple dans [66]. Il s'agit de faire une corrélation entre deux images successives prises au même endroit du champ de gouttes. On obtient ainsi le déplacement moyen des points lumineux dans une petite cellule de maillage. Connaissant le temps espaçant les deux photos on obtient

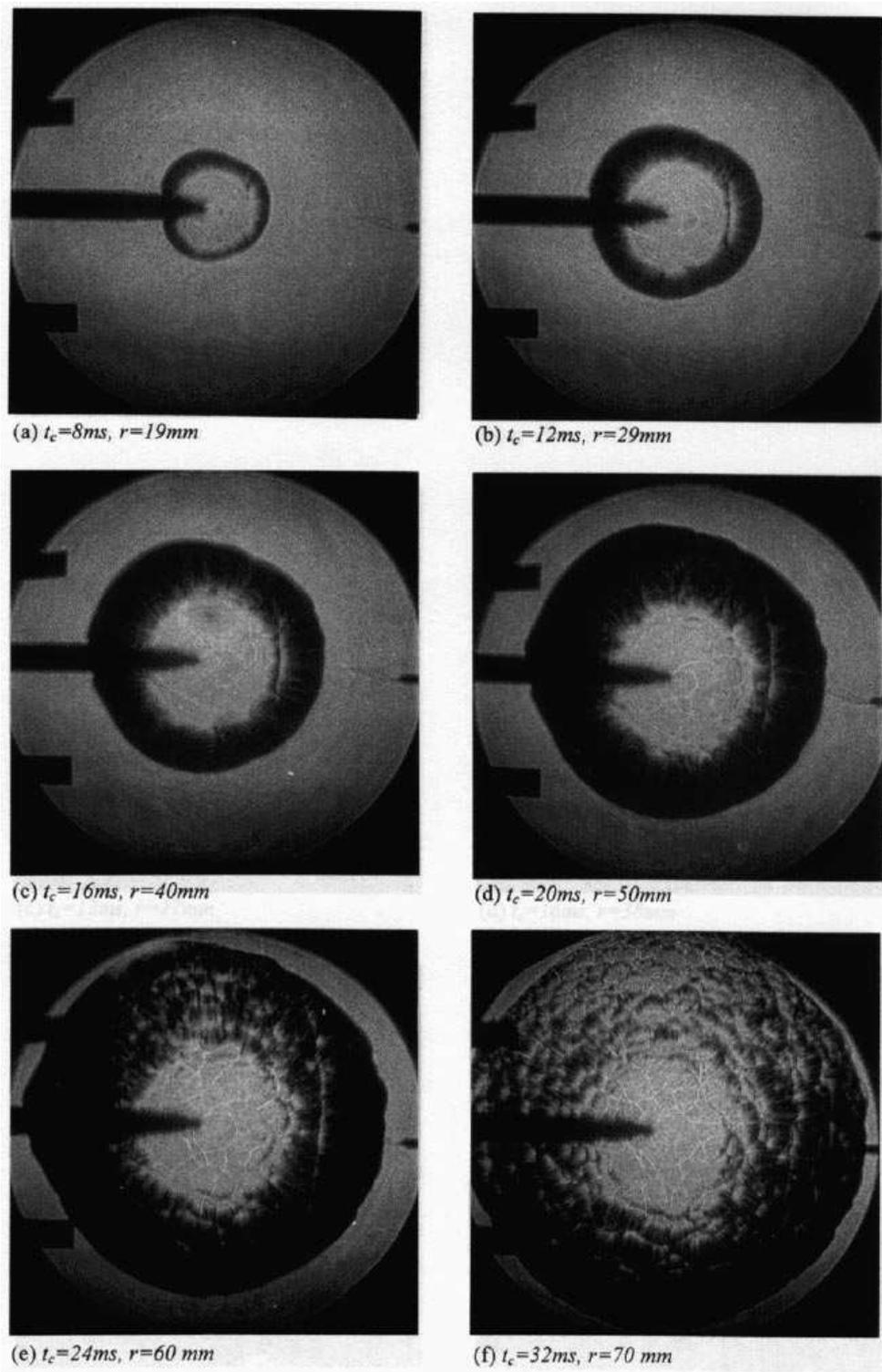


FIG. 3.26 - Evolution d'une flamme sphérique d'iso-octane-air diphasique , $\Phi_{ov} = 1.2$ $\Phi_g = 1.18$ $p = 1.4bar$, $T = 278K$.

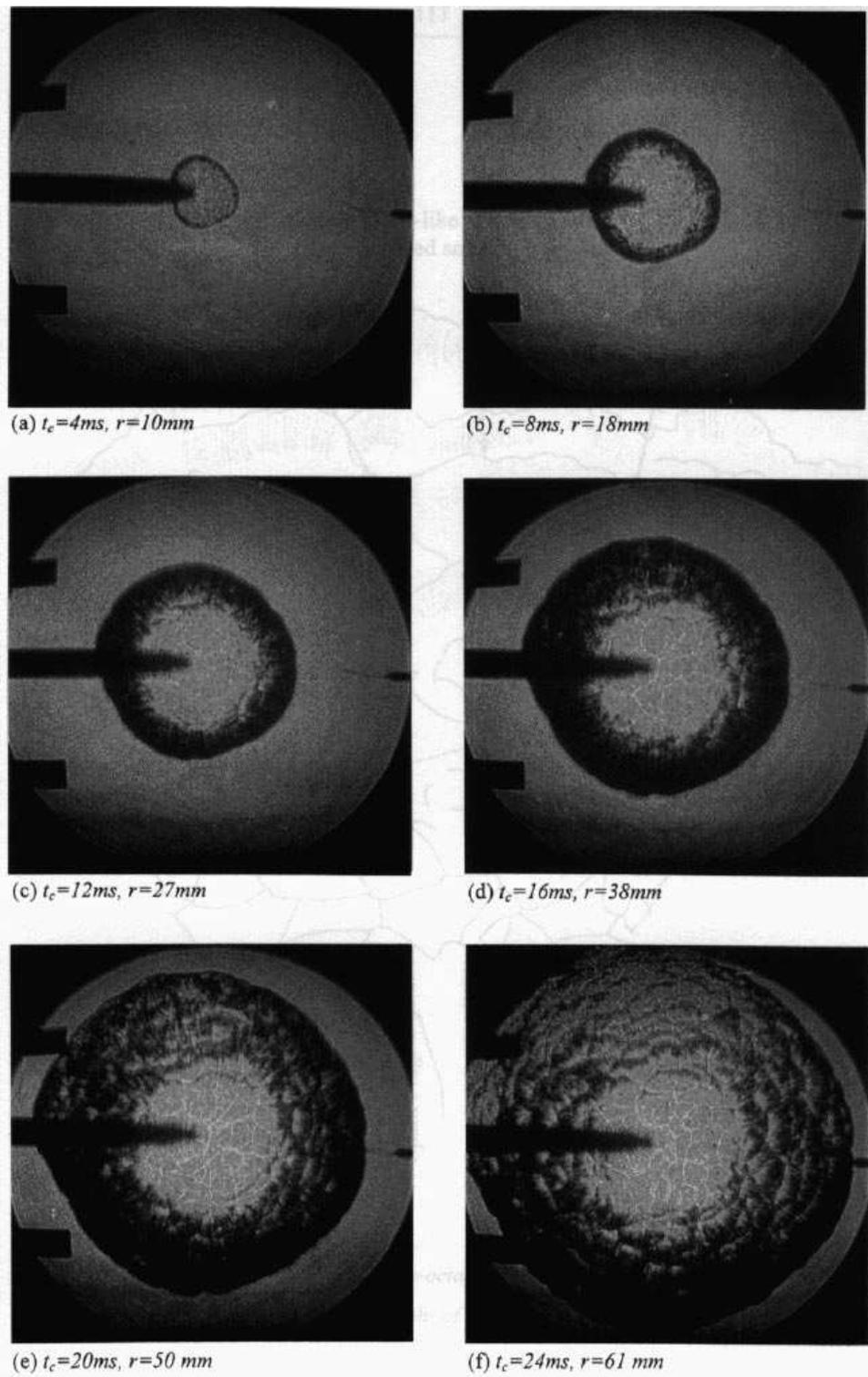


FIG. 3.27 – Evolution d'une flamme sphérique d'iso-octane-air diphasique , $\Phi_{ov} = 1.2$ $\Phi_g = 1.03$ $p = 1.2bar$, $T = 273K$.

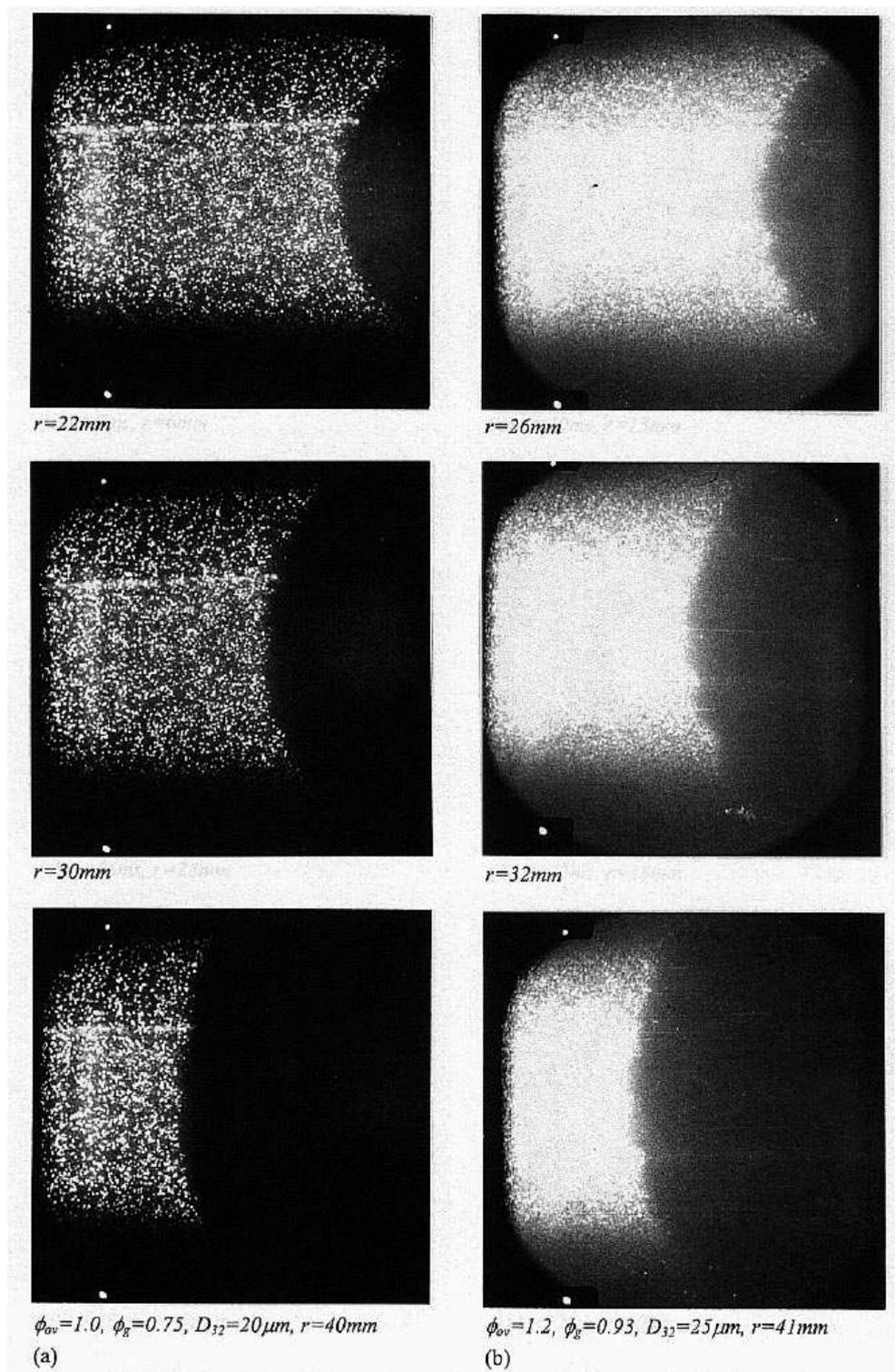


FIG. 3.28 – Visualisation par tranche laser du champ de gouttes durant la propagation de la flamme. A gauche sans ajout de fumée de cigarette, à droite avec fumée.

la vitesse du centre de la cellule. Les gouttes sont directement utilisées comme marqueurs des mouvements du fluide. Ceci évite tous les problèmes liés à l'injection d'un autre marqueur, cependant la taille des gouttes et leur inertie peut les empêcher de suivre parfaitement les mouvements du gaz. Un exemple de champ de vitesse pour une flamme de spray laminaire est présenté Figure: 3.29. La qualité du résultat est satisfaisante devant la flamme. Sur les bords de la flamme la densité de particules par cellules de mesure chute et la précision est moins bonne. On voit que l'expansion des gaz entraîne les gouttes, celles qui sont le plus près de la flamme ont la vitesse la plus rapide. Bien que le cas représenté montre des perturbations du front de flamme le champ de vitesse des gouttes est uniforme à la précision de mesure près.

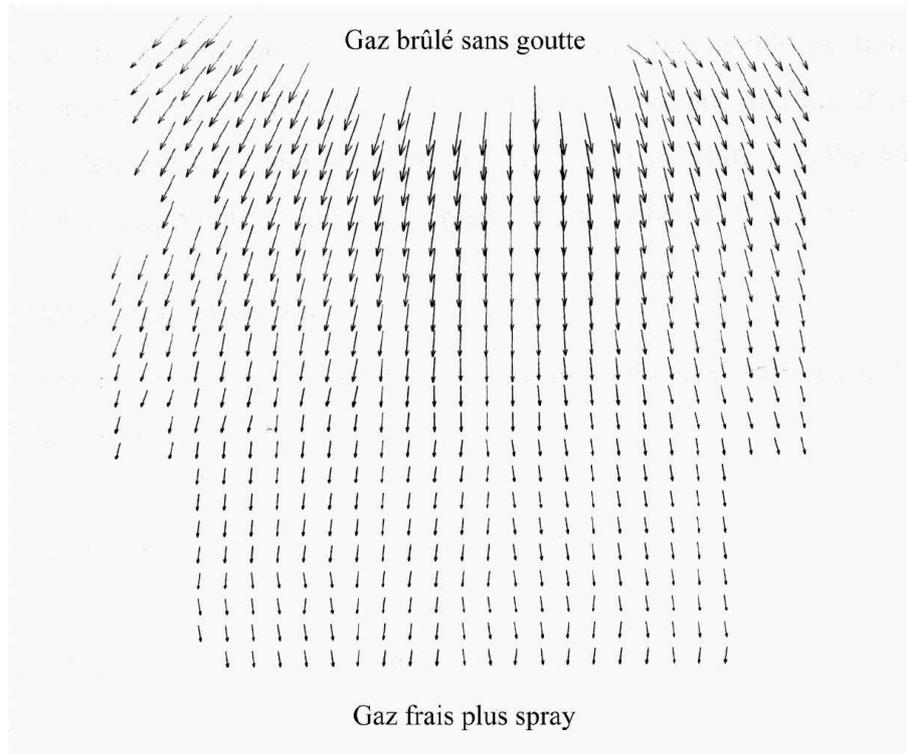


FIG. 3.29 – *Mesure du champ de vitesse des gouttes de fuel devant une flamme sphérique en expansion.*

Nous avons représenté Figure: 3.30 la vitesse des gouttes mesurée par PIV dans la direction radiale. La vitesse des gouttes ne correspond pas exactement à la vitesse du gaz. Il semblerait donc que même dans le cas d'une flamme sphérique qui se propage dans un champ de gouttes initialement au repos, l'accélération du gaz ne peut être suivie instantanément par les gouttes.

Flammes oscillantes

En mesurant successivement le rayon de la flamme sur les films obtenus par ombroscopie on obtient les courbes de vitesse de flamme en fonction du rayon. Nous avons représenté Figure: 3.31 une de ces courbes, pour flamme d'iso-octane-air gazeuse, qui se décompose en

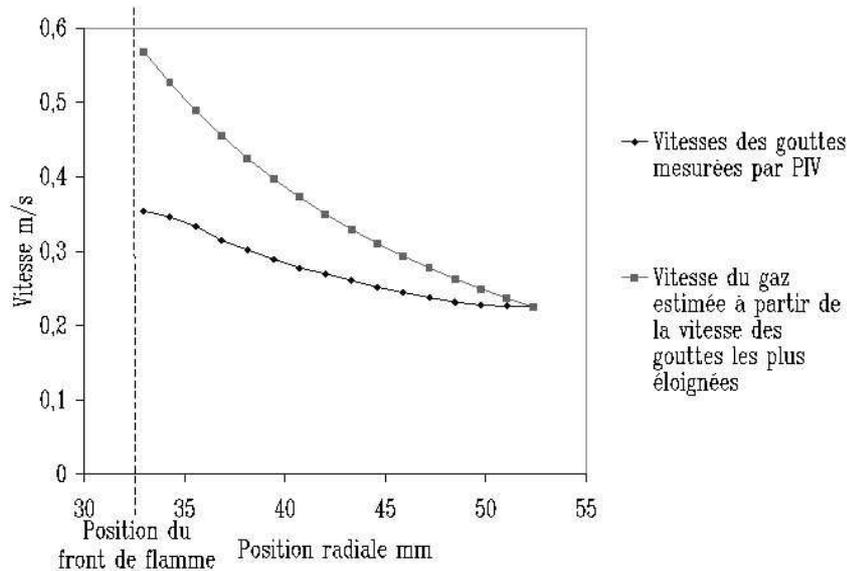


FIG. 3.30 – Comparaison du profil de vitesse des gouttes et du gaz dans la direction radiale devant la flamme. La vitesse du gaz est supposée être égale à la vitesse des gouttes les plus éloignées. Le profil de vitesse en fonction du rayon est ensuite calculé grâce à l'équation de conservation de la masse qui donne: $u_g r^2 = \text{constante}$.

quatre étapes:

- 1 : Le dépôt d'énergie de la bougie provoque l'expansion thermique du noyau de flamme;
- 1 → 2 : Au fur et à mesure que l'énergie initiale se dilue la vitesse de flamme décroît;
- 2 → 3 : Les processus chimiques s'accélèrent, la vitesse de flamme s'établit;
- 3 → 4 : La vitesse de flamme ne dépend plus que de l'étirement qui diminue au fur et à mesure que le rayon de flamme croît.

Sur la figure Figure: 3.32 nous avons représenté les points de mesure de la vitesse de flamme dans le cas diphasique. Bien que l'on ne puisse pas comparer pour des conditions initiales identiques les flammes de spray et les flammes gazeuses, on peut remarquer que la vitesse de flamme est du même ordre de grandeur et que les différentes étapes de la combustion existent toujours. Globalement, dans sa thèse [5], Frank Atzler montre que les flammes diphasiques ont tendance à être un peu plus rapides que les flammes gazeuses. Cela pourrait être dû au plissement de la flamme par les cellules d'instabilités qui en augmentant la surface de flamme augmenterait sa vitesse de propagation. La présence des gouttes modifie aussi la réponse de la flamme au changement de richesse. Pour les flammes gazeuses le maximum

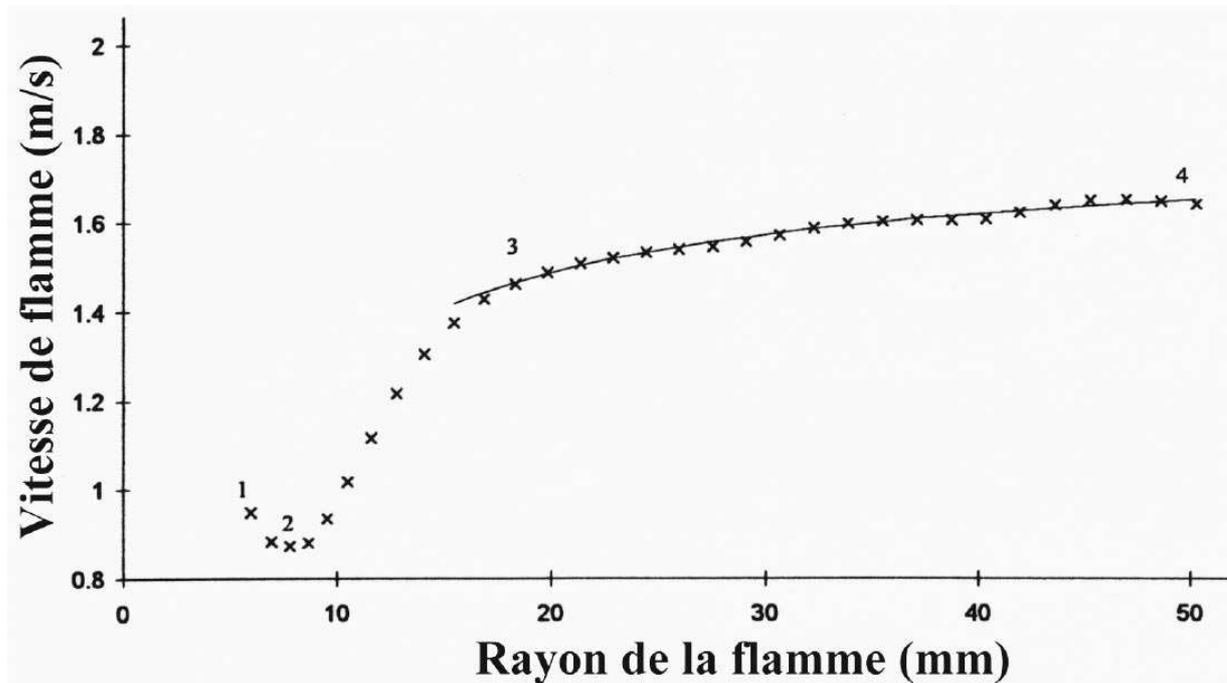


FIG. 3.31 – Evolution du profil de vitesse de flamme en fonction du rayon de la flamme. Les symboles sont les mesures, la ligne continue est l'approximation utilisée pour l'extrapolation de la vitesse de flamme laminaire: u_l .

de vitesse est atteint pour des flammes proches de la stœchiométrie. Par exemple, pour une flamme d'iso-octane-air le maximum de vitesse est obtenu pour une richesse $\Phi \approx 1.05$ [15]. On observe clairement, dans le cas des flammes diphasiques étudiées, que le maximum de vitesse se situe à une richesse bien plus élevée que dans le cas gazeux puisque les vitesses des flammes diphasiques de richesse $\Phi_{ov} = 1.2$ sont bien supérieures à celles obtenues pour des richesses $\Phi_{ov} = 1$. Ceci est aussi corroboré par les expériences de Hiroyasu et *al* [56], qui ont étudié l'allumage et la propagation de flamme de kérosène-propane-air. On voit Figure: 3.33 la vitesse de propagation de la flamme représentée en fonction de la richesse totale et du paramètre F_g qui est la fraction de fuel gazeux dans le fuel total. On voit clairement que plus il y a de fuel sous forme liquide plus le maximum de vitesse se situe pour des richesses élevées.

Parmi les flammes de spray qui ont été étudiées certaines ont eu un comportement que l'on n'a pas observé pour des flammes gazeuses. La vitesse de ces flammes oscille au cours de leur évolution de façon très marquée. La Figure: 3.34 montre leur courbe d'évolution de vitesse de flamme en fonction du rayon. De plus ces flammes présentent des oscillations du front de flamme qui apparaissent et disparaissent. Les périodes de vitesse rapide coïncident avec la présence de perturbations du front de flamme mais il n'est pas possible de dire si c'est l'apparition de ces perturbations qui devance l'accélération de la flamme ou l'inverse. Ces flammes pulsantes ont été observées pour les richesses globales $\Phi_{ov} = 1$ et $\Phi_{ov} = 0.8$ mais jamais pour la richesse $\Phi_{ov} = 1.2$. Elles n'ont ce comportement que pour des richesses gazeuses petites c'est-à-dire quand une partie non négligeable de fuel s'est condensée sous

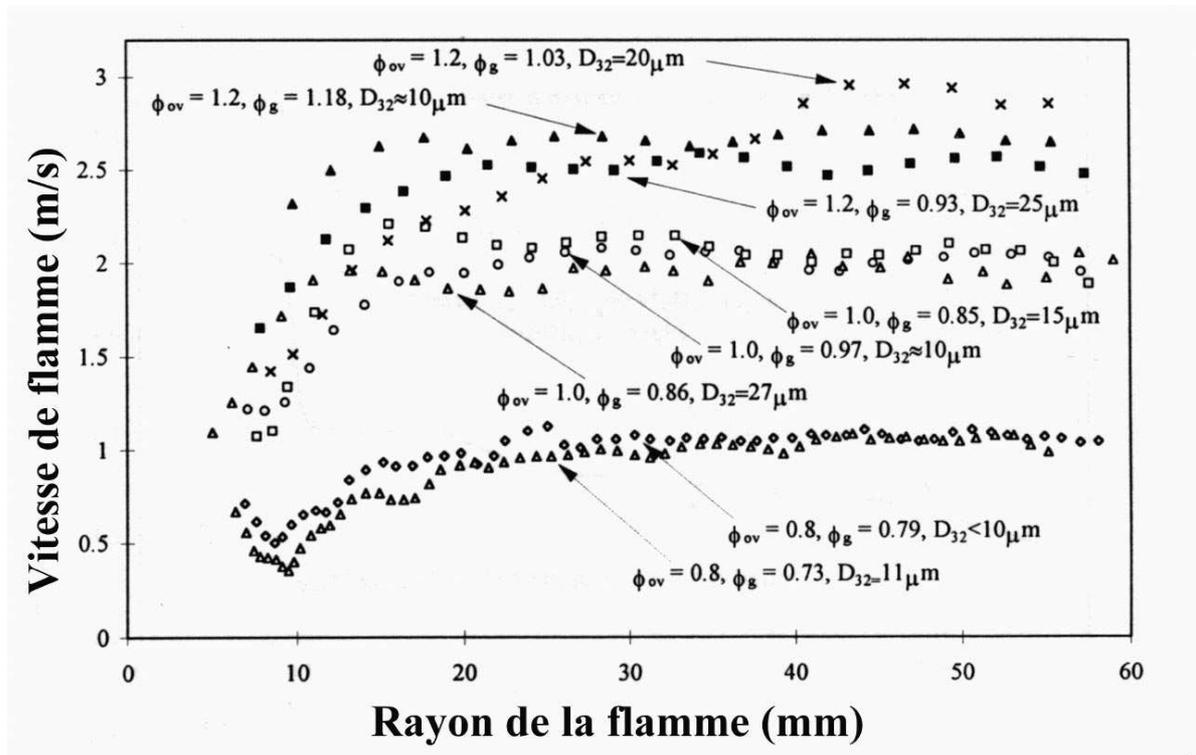


FIG. 3.32 – Mesure de la vitesse de flamme diphasique en fonction de la position radiale de la flamme pour différentes richesses totales: Φ_{ov} et gazeuses: Φ_g

forme de goutte. En effet plus la richesse gazeuse est proche de la richesse globale moins il y a de fuel sous forme liquide et plus on est proche du cas purement gazeux qui ne montre pas ce type d'oscillation.

Le mécanisme qui génèrent ces flammes pulsantes n'est pas encore complètement expliqué. Lawes suggère que les pulsations pourraient être dues aux variations du "stretch". Hanai et al [55], ont observé le même types de phénomènes pour la combustion de particules de polyméthylmétacrylat (PMMA), ils suggèrent un mécanisme basé sur les effets radiatifs. Quelque soit la cause initiale des fluctuations, leur amplification spectaculaire semble bien due à l'inertie des gouttelettes. Celles-ci en créant un décalage de vitesse entre le gaz et le liquide produisent des fluctuations de richesse qui amplifient les pulsations de la flamme, cela a été montré dans le cas d'instabilités acoustiques [25],[26]. Des travaux sont en cours pour simuler ce phénomène [30]. Il semble que le décalage de vitesse qu'il peut y avoir entre le gaz et le liquide soit un paramètre très important.

Beaucoup d'approches de la théorie des flammes en combustion se basent sur la vitesse de flamme laminaire dans le cas gazeux. Il est tentant de vouloir étendre cette approche au cas diphasique. Cependant en plus des paramètres du spray, par exemple rayon des gouttes, densité de gouttes par unité de volume, il faut ajouter les effets de la différence de vitesse entre le gaz et le spray. Cela fait beaucoup de paramètres supplémentaires qui n'ont pas permis pour l'instant de mesurer ou de calculer la vitesse de flammes laminaires intrinsèques dans le cas d'un prémélange diphasique. La vitesse du spray par rapport au gaz est une caractéristique

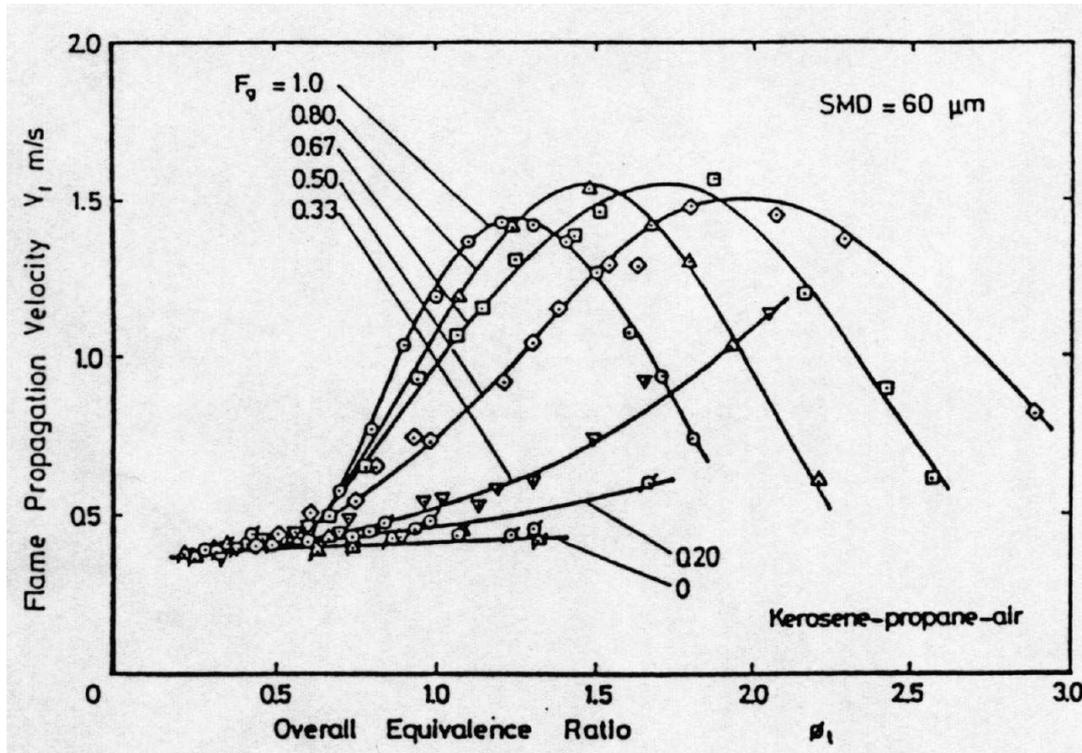


FIG. 3.33 – Evolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse totale Φ_t d'après [56]. On voit que le maximum de vitesse se décale vers les richesses élevées quand la fraction de fuel sous forme gazeuse F_g diminue.

primordiale de la combustion diphasique.

Flammes turbulentes

Nous avons aussi profité de ce dispositif expérimental pour étudier quelques flammes turbulentes diphasiques. Le principe des mesures est identique, la seule différence est que les ventilateurs qui créent de la turbulence fonctionnent durant la combustion. La turbulence ainsi formée est supposée homogène isotrope au centre de la bombe. Les échelles caractéristiques permettant de la décrire ont été mesurées à Leeds dans [95]. Des mesures de vitesse de flammes turbulentes gazeuses y ont été faites [16]. La Figure: 3.35 montre des photos prises par ombroscopie pour des flammes stœchiométriques, en haut gazeuses et en bas diphasiques, pour différentes valeurs de u' . Les fluctuations de vitesse ne sont pas exactement les mêmes et les photos des flammes gazeuses sont prises dans la nouvelle bombe de Leeds qui suit le même principe que celle décrite précédemment. Cependant il apparaît clairement que la présence des gouttes crée des structures plus fines et provoque un plissement plus intense de la flamme. En comparant la photo de flamme gazeuse pour $u' = 1.2m/s$ et celle diphasique pour $u' = 0.83m/s$ on voit que même pour des fluctuations de vitesse moindre la flamme diphasique est plus plissée. Il semble raisonnable d'en déduire que même dans le cas turbulent les fluctuations induites par la présence des gouttes ne sont pas négligeables et jouent un rôle.

Le calcul de la vitesse de flamme turbulente à partir des images d'ombroscopie ne peut

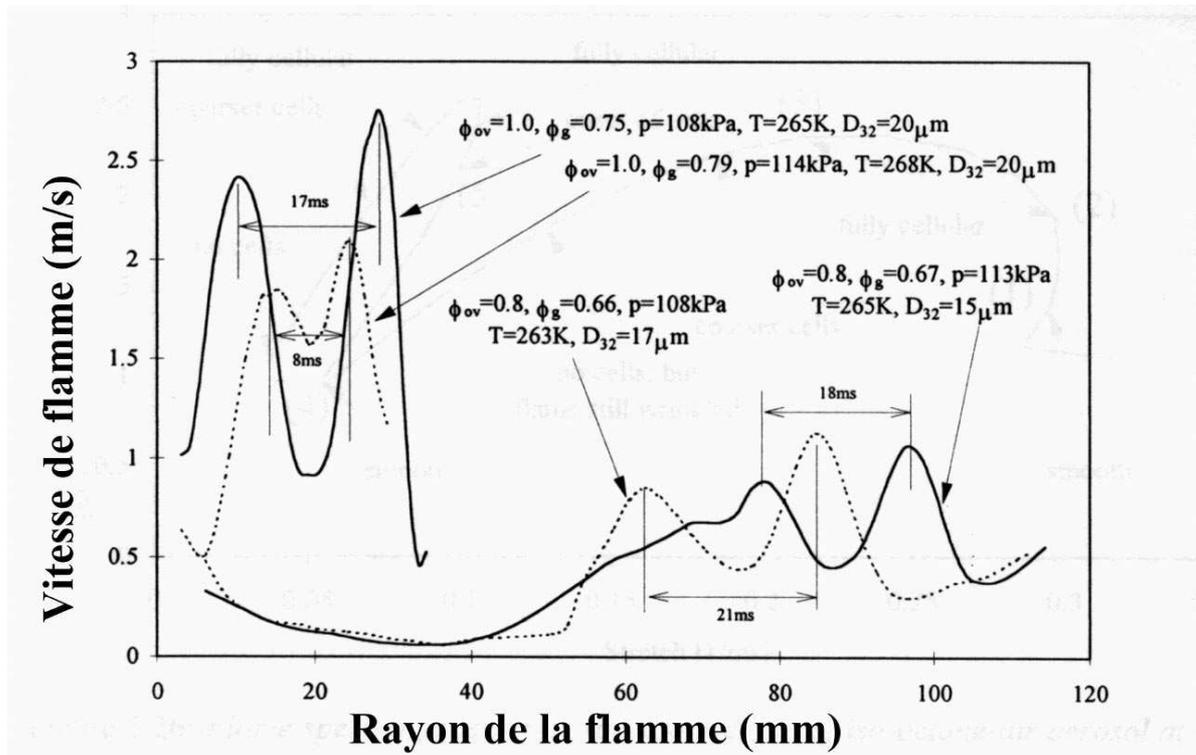


FIG. 3.34 – Evolution de la vitesse de flamme en fonction de la position radiale du front de flamme, cas des flammes pulsantes.

pas se faire comme dans le cas laminaire. Il suffisait alors de mesurer le rayon de la flamme à chaque pas de temps suivant trois axes et la moyenne de la mesure ne fluctuant quasiment pas correspond bien au rayon de la flamme. Ici du fait de la turbulence la flamme perd sa symétrie sphérique. De plus le bord de la flamme est mal défini du fait de la projection en 2D. On s'attend à trouver une vitesse qui fluctue autour de la vraie vitesse moyenne, il faut donc refaire l'expérience plusieurs fois et prendre la moyenne des résultats. Nous avons mesuré la surface de la projection de la flamme et calculé le rayon du disque de surface équivalente, les résultats sont représentés Figure: 3.36. Comme prévu les points sont un peu dispersés et cela est encore vrai quand on extrait la vitesse de flamme turbulente Figure: 3.37. Il faudrait pour bien déterminer cette vitesse de flamme faire plus d'expériences. On peut cependant remarquer que cette vitesse est plus grande que pour les flammes laminaires diphasiques et qu'elle croît avec le rayon ou avec le temps.

Nous avons aussi appliqué la technique de visualisation par tranche laser du champ de goutte. La Figure: 3.38 montre trois photos successives du champ de goutte. La première remarque est que les gouttes ne sont pas réparties de façon homogène, bien que l'on ait employé la même technique de préparation du spray. Cela pourrait être dû aux fluctuations de température et de pression engendrées par la turbulence qui crée localement des sites favorables de nucléation. Cependant on s'attendrait à ce que le mélange homogénéise petit à petit les amas de gouttes ainsi formés. Une autre possibilité est que les gouttes ne pouvant pas suivre exactement les mouvements du fluide se concentrent à certains endroits. Nous avons

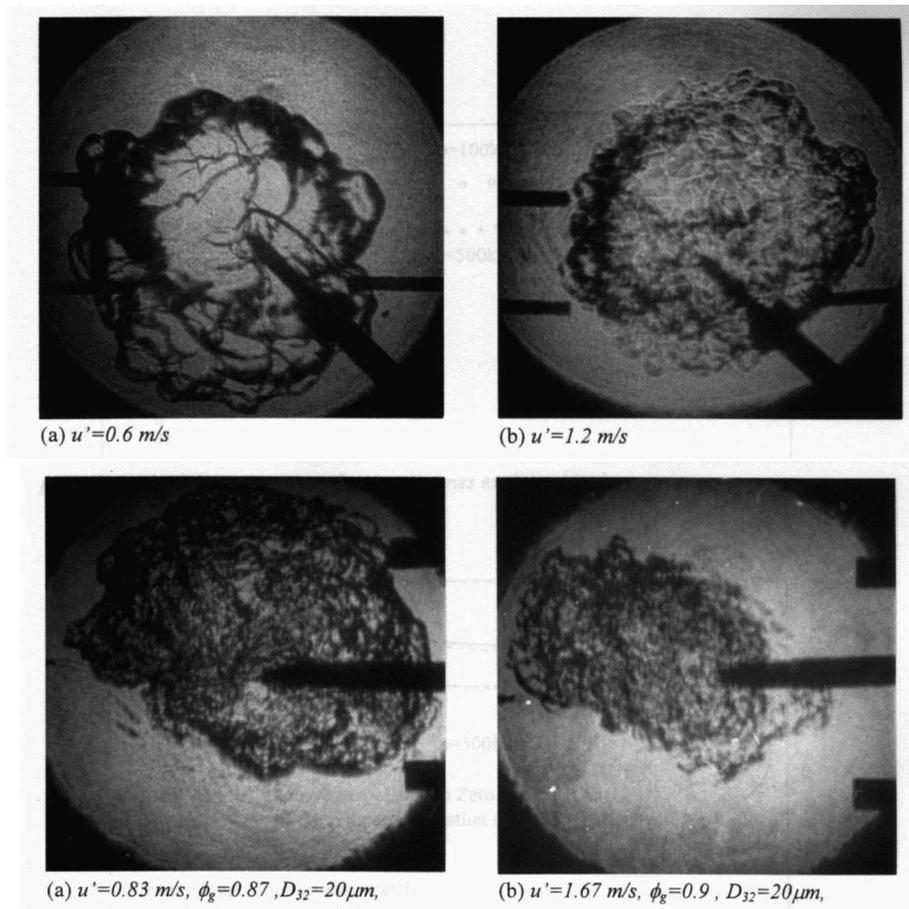


FIG. 3.35 – Photo prise par ombroscopie de flammes turbulentes, en haut pour des flammes purement gazeuses et en bas pour des flammes diphasiques

utilisé la technique de PIV pour visualiser le champ de vitesse des gouttes 3.39. Là où il n'y a pas de gouttes le champ de vitesse a été interpolé. Il n'y a pas de corrélation visible entre le champ de vitesse et la densité de goutte. Finalement il est probable que ces rassemblements de gouttes auront comme conséquence lorsque les gouttes vont s'évaporer d'augmenter les fluctuations de richesse.

Nous avons aussi pu remarquer sur nombre de photos, comme celles présentées Figure: 3.38, une tâche lumineuse sur le bord du champ de goutte là où la flamme avance. Son origine n'est pas encore bien déterminée. Il pourrait s'agir de suies en supposant que la zone en train de réagir est riche. Cependant si on regarde les photos précédentes on ne remarque pas une densité de particule spécialement élevée à cet endroit. On peut remarquer que c'est principalement près de ces tâches que la flamme avance.

conclusion

Cette étude sur les flammes turbulentes n'est pas encore assez avancée pour permettre de bien comprendre l'action des gouttes sur la flamme. On peut cependant remarquer que

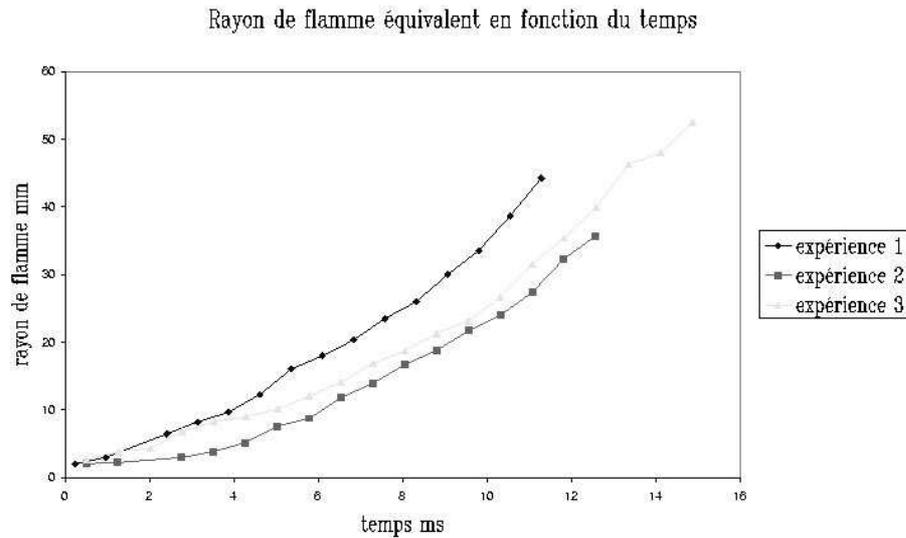


FIG. 3.36 – Evolution du rayon de flamme équivalent pour 3 expériences similaires.

les gouttes ont un effet sur la flamme laminaire ou turbulente, que cet effet semble dû aux fluctuations de richesse créées par la présence des gouttes. Ces expériences ont aussi montré que en plus des caractéristiques du spray et de la chimie, il fallait prendre aussi en compte une caractéristique liée à l'écoulement: la différence de vitesse entre les gouttes et l'écoulement gazeux. Cette caractéristique peut évoluer au cours de la combustion et joue, à cause de l'inertie des gouttes, un rôle important pour les flammes laminaires (flamme pulsante) et pour les flammes turbulentes (non homogénéité du champ de goutte). Cet effet a aussi été mis en valeur par les travaux réalisés par Hiroyasu et *al* [56] lors d'une autre phase essentielle de la combustion: l'allumage. Ils ont montré que, à richesse totale et gazeuse constante, la probabilité d'allumage augmente quand on diminue la taille des gouttes, mais aussi qu'elle finit par diminuer à partir d'une certaine taille de goutte. L'explication serait que les si les gouttes sont trop petites elles sont projetées loin de la bougie par l'expansion initiale des gaz chauds, alors à cause de leur inertie elles continuent sur leur lancée et finissent par laisser près de la flamme une zone de richesse trop petite pour permettre sa propagation.

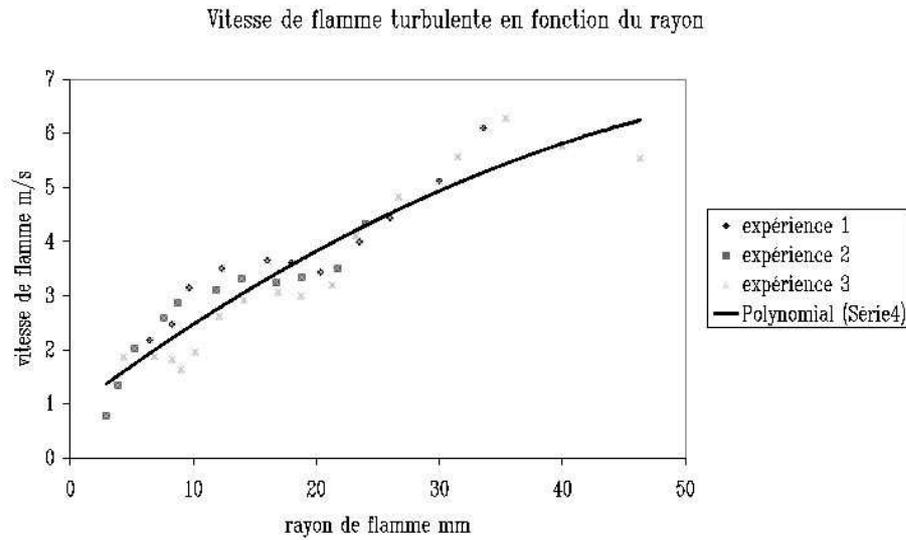


FIG. 3.37 – Les symboles représentent la vitesse de flamme turbulente mesurée pour 3 expériences, la ligne continue est une approximation polynomiale des mesures.

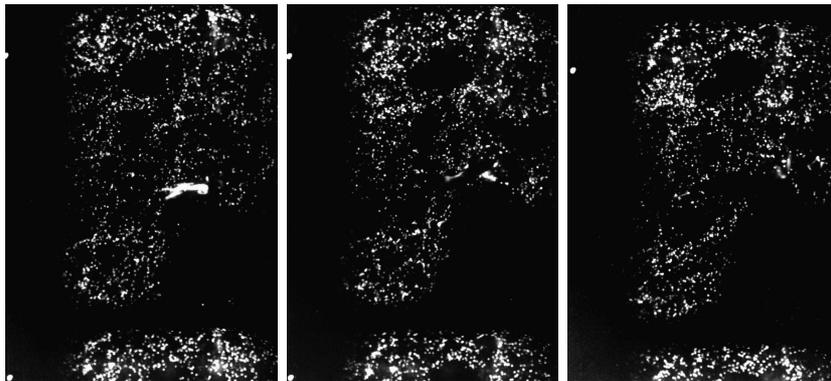


FIG. 3.38 – Photos successives du champ de goutte éclairé par un plan laser. La fréquence de prise de vue est $f = 2000\text{Hz}$ et la fluctuation de vitesse est $u' = 1.4\text{m/s}$.

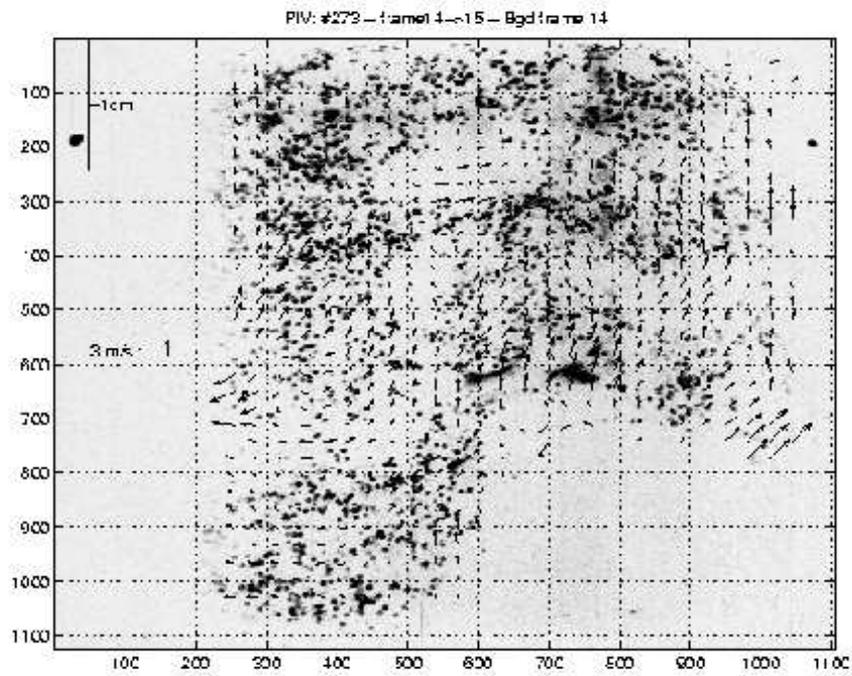


FIG. 3.39 – Photo négative du champ de goutte éclairé par un plan laser avec en superposition la vitesse des gouttes calculées par PIV.

Chapitre 4

Equations pour des milieux diphasiques réactifs

Le fait que le fluide contienne deux phases pose un problème dès l'écriture des premières équations de la mécanique des fluides. En effet celles-ci viennent d'une description plus générale qui est la mécanique des milieux continus. Cela paraît contradictoire avec un milieu à deux phases liquide-gaz, car en considérant que la surface de contact entre le liquide et le gaz est infiniment mince, la masse volumique devient une variable discontinue à l'interface. C'est pourquoi nous discuterons dans la première partie l'écriture des équations exactes. Dans la seconde partie nous choisirons et utiliserons une méthode pour décrire un milieu diphasique turbulent où l'utilisation directe des équations exactes n'est plus possible du fait de la complexité de l'écoulement. Cela nécessitera l'utilisation d'équations de transport pour les valeurs moyennes qui feront apparaître des termes non fermés. Nous appliquerons autant que possible les méthodes de fermeture utilisées habituellement pour les milieux gazeux. Il reste cependant des termes nouveaux qui seront examinés lors du prochain chapitre.

4.1 Description instantanée

4.1.1 Equations de base pour un fluide réactif monophasique

Nous rappelons les équations fondamentales qui caractérisent un fluide monophasique contenant des espèces réactives. Ces équations aux dérivées partielles qui décrivent les processus de combustion sont bien établies et forment une base solide. Elles ont été écrites pour un fluide ne contenant qu'une seule phase et dans lequel les variables décrivant le fluide sont continues. Les équations qui suivent proviennent directement des principes de conservation, leur démonstration est disponible par exemple dans [8]. Les notations introduites ici serviront pour la suite.

– Equation de continuité¹

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha \rho}{\partial x_\alpha} = 0 \quad (4.1)$$

1. Si ce n'est pas précisé, la convention habituelle de somme sur les indices est utilisée

où :

- ρ est la masse volumique totale, somme des masses volumiques de chaque espèce :

$$\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i$$

- u_α est la vitesse dans la direction α ;
- Equation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_\beta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial p}{\partial x_\beta} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\overbrace{\mu \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha,\beta}}^{\tau_{\alpha\beta}} \right] + \rho G_\beta$$

où :

- p est la pression;
- μ est la viscosité dynamique;
- G_β est la résultante des forces de volume projetées dans la direction β , par unité de masse;
- $\tau_{\alpha\beta}$ est le tenseur des contraintes visqueuses.
- Equation pour l'espèce i :

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Y_i}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} \right) + \rho \omega_{c_i}$$

où :

- Y_i est la fraction massique de l'espèce i : $Y_i = \frac{\rho_i}{\rho}$;
- ω_{c_i} est le taux de réaction chimique de l'espèce i , en masse de i par unité de masse totale et de temps;
- On représente la diffusion moléculaire par une loi de Fick (On néglige les phénomènes de barodiffusion, de thermodiffusion et de multidiffusion);
- D_i est le coefficient de diffusion laminaire, il peut être relié à μ par le nombre de Schmidt de l'espèce i : $D_i = \frac{\mu}{\rho S_{c_i}} = \frac{\nu}{S_{c_i}}$;
- ν est la viscosité cinématique.
- Equation de l'énergie

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha e}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial p u_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} + \rho \sum_i D_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} \right] + \rho G_\alpha u_\alpha$$

où :

- e est l'énergie interne: $e = h - \frac{p}{\rho}$, on néglige ici l'énergie cinétique par rapport à l'énergie interne, car on ne va s'intéresser qu'à des écoulements faiblement subsoniques;

– h est l'enthalpie, chaleur de formation incluse :

$$h = \sum_i \left[Y_i \int_0^T c_{p_i}(T) dT + Y_i Q_f^0 \right]$$

– c_p est la capacité calorifique totale donnée par celle de toutes les espèces :

$$c_p(T) = \sum_i Y_i c_{p_i}(T);$$

– λ est le coefficient de conductivité thermique.

Nous négligerons les forces de volume, l'énergie cinétique, le travail des contraintes visqueuses devant les autres termes. On suppose souvent que :

$$Sc_i = 1, \forall i$$

Ce qui nous donne tous les coefficients de diffusion laminaire égaux :

$$D_i = D, \forall i$$

Le nombre de Lewis est défini par :

$$\mathcal{L}e = \frac{a}{D}$$

où :

– a est la diffusivité thermique : $a = \frac{\lambda}{\rho c_p}$

En supposant, de plus, que le nombre de Lewis est égal à un, on a [13]:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha e}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial p u_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(D \frac{\partial h}{\partial x_\alpha} \right)$$

ou

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha h}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(D \frac{\partial h}{\partial x_\alpha} \right) + \frac{\partial p}{\partial t}$$

Notons que les simplifications concernant les nombres de Lewis et de Schmidt ne sont pas pleinement justifiées dans la réalité. Elles sont principalement faites pour simplifier des écritures souvent très compliquées. Le nombre de Schmidt est caractéristique de la diffusion d'une espèce vers un milieu contenant d'autres espèces. Le nombre de Lewis représente le rapport de vitesse de diffusion de l'agitation thermique par rapport à la vitesse de diffusion de l'espèce. Ces nombres sont rarement très différents de un, sauf par exemple dans le cas de la combustion de l'hydrogène. Mais la différence de vitesse entre le flux thermique et le flux de masse caractérisé par un Lewis différent de un, peut entraîner des instabilités du front de flamme. [27]

Comme nous considérons la combustion qui a lieu dans les moteurs ces hypothèses ne sont pas trop rudes. Le carburant utilisé n'est généralement pas de l'hydrogène sauf dans certains cas particuliers [44]. Et nous nous plaçons dans l'hypothèse où les perturbations du front de flamme dues à la turbulence sont prépondérantes sur celles dues aux instabilités.

A ces équations nous rajoutons l'équation d'état des gaz parfaits :

$$p = \frac{\rho R T}{\mathcal{M}}$$

où :

– R est la constante des gaz parfaits;

– \mathcal{M} est la masse molaire totale, fonction de la masse molaire de toutes les espèces :

$$\frac{1}{\mathcal{M}} = \sum_i \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i}$$

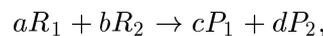
Nous avons ainsi un ensemble d'équations qui décrit la mécanique des fluides liée à un milieu réactif. Mais il reste à exprimer le taux de réaction chimique de l'espèce i . Ceci sort un peu du domaine de la mécanique des fluides car le cinéticien cherche à s'affranchir des effets de l'écoulement. Pour cela il se place dans des configurations particulières tel que le réacteur homogène parfaitement prémélangé. Dans ce réacteur la concentration de toutes les espèces est homogène dans l'espace même au niveau des petites échelles. Il n'y a ainsi aucun gradient de concentration ce qui permet de réécrire les équations pour les fractions massiques comme:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = \rho \omega_{c_i},$$

ce qui permet de n'étudier que l'effet du taux de réaction.

Il faut ensuite détailler le plus possible tous les mécanismes possibles de formation et de destruction de toutes les espèces.

Le schéma complet se compose de réactions élémentaires telles que:



où a, b, c et d sont les coefficients stœchiométriques.

Les lois cinétiques permettent d'écrire la vitesse de consommation des réactifs R_1 et R_2 ou la vitesse de formation des produits P_1 et P_2 , en fonction des concentrations de R_1 et R_2 :

$$\frac{[R_1]}{dt} = k [R_1]^a [R_2]^b,$$

où k est la "constante" de vitesse de la réaction, a et b les ordres partiels relatifs respectivement à R_1 et R_2 . Mais k n'est pas une constante et varie avec la température, on utilise une loi de type Arrhénius pour représenter cette variation:

$$k = AT^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right),$$

où A est "le facteur préexponentiel" et E_a "l'énergie d'activation".

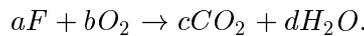
La détermination des constantes de vitesse de ces réactions élémentaires peut se faire dans quelques cas théoriquement mais la plupart ont été obtenues expérimentalement. Encore maintenant les modèles détaillés ne sont pas encore parfaitement établis pour tous les combustibles.

Quand ils existent, il faut utiliser des codes de calculs spécialisés, tel que CHEMKIN II [59] pour résoudre les grands systèmes d'équations différentielles ainsi obtenus. Une grande quantité de données sur les vitesses de réaction et sur les constantes chimiques liées à la combustion y sont rassemblées. De plus ces codes sont capables de traiter des réactions ayant des échelles de temps très différentes. La formation des NO_x a un temps caractéristique qui peut être de l'ordre de la seconde tandis que les réactions radicalaires les plus rapides ont des temps caractéristiques jusqu'à 10^{-10} s. Cette disparité des échelles de temps s'appelle la raideur du système d'équations différentielles et elle est source de problèmes numériques. Il peut arriver que la stabilité numérique et la détermination de la solution ne puissent être

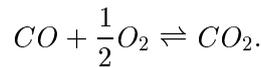
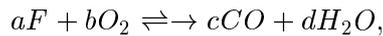
obtenues que si le pas de temps est réduit à l'échelle de temps la plus petite [75]. De plus les besoins en mémoire et en temps de calcul augmentent comme le carré du nombre d'espèces mises en jeu [110].

Finalement des techniques sont mises au point pour réduire les schémas cinétiques afin qu'ils puissent être utilisés dans des écoulements complexes. La précision et les phénomènes que l'on regarde vont dicter le niveau de simplification maximale. Le schéma réduit le plus simple consiste en une seule équation globale qui est le bilan de toutes les équations élémentaires.

Par exemple Westbrook et Dryer ont étudié les flammes laminares de méthanol [107, 108] en utilisant un mécanisme détaillé comprenant 26 espèces et 84 réactions élémentaires. La figure 4.1 montre le schéma complet utilisé et les constantes correspondantes pour les vitesses réactions. Puis dans d'autres articles [109] ils ont proposé des schémas réduits à une seule équation et aux espèces principales: fuel, oxygène, dioxyde de carbone et vapeur d'eau



Les constantes intervenant dans le calcul du taux de réaction ont été ajustées pour retrouver les bonnes vitesses de flamme laminaire prémélangée sur une gamme de richesse assez étendue. Cependant la simplicité du schéma empêche de retrouver toutes les caractéristiques de la combustion. Ainsi la température de fin de combustion calculée, en supposant que tous les réactifs ont réagi complètement en ne donnant que du CO_2 et du H_2O , est trop forte. Dans le schéma détaillé, pour les hautes températures, des réactions endothermiques sont activées, ce qui limite la température de flamme. Notamment il existe à l'équilibre du dihydrogène et du monoxyde d'azote. Si le mécanisme d'équilibre $CO - CO_2$ est rajouté et le schéma devient un schéma à deux équations contenant une espèce supplémentaire: le CO .



On obtient ainsi de meilleurs températures adiabatiques de flamme comme on le voit dans le tableau 4.1 où l'on compare les résultats obtenus à différentes richesses pour l'oxydation du méthane.

Φ	schéma détaillé			schéma à 1 étape	schéma à 2 étapes	
	T_{ad}	$\frac{[CO]}{[CO_2]}$	$\frac{[H_2]}{[H_2O]}$	T_{ad}	T_{ad}	$\frac{[CO]}{[CO_2]}$
0.8	1990	0.03	0.005	2017	1975	0.08
1.0	2220	0.11	0.02	2320	2250	0.14
1.2	2140	0.69	0.15	2260	2200	0.43

TAB. 4.1 – Comparaison des résultats obtenus à l'équilibre pour différents schémas cinétiques représentant la combustion du méthane, d'après [109]

Cependant cela ne permet pas de trouver les bons rapports de concentration $\frac{[CO]}{[CO_2]}$ et évidemment pas la bonne concentration de H_2 cette espèce n'étant pas prise en compte dans le schéma. Il apparait aussi que certaines espèces peuvent être incluses pour mieux calculer les espèces principales ou la température, ici c'est le cas du CO . En incluant le mécanisme du CO on ne peut pas prendre aussi en compte les effets du mécanisme d'équilibre $H_2 - H_2O$ ce qui fausse le calcul de la concentration de CO .

Methanol Oxidation Mechanism. Reaction rates in $\text{cm}^3\text{-mole-sec-kcal}$ units, $k = AT^n \exp(-E_a/RT)$

Reaction	Rate		
	$\log A$	n	E_a
1 $\text{CH}_3\text{OH} + \text{M} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH} + \text{M}$	18.5	0	80.0
2 $\text{CH}_3\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{HO}_2$	13.6	0	50.9
3 $\text{CH}_3\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	12.6	0	2.0
4 $\text{CH}_3\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{OH}$	12.2	0	2.3
5 $\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2$	13.5	0	7.0
6 $\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	12.7	0	5.3
7 $\text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{CH}_4$	11.3	0	9.8
8 $\text{CH}_3\text{OH} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2$	12.8	0	19.4
9 $\text{CH}_2\text{OH} + \text{M} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$	13.4	0	29.0
10 $\text{CH}_2\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	12.0	0	6.0
11 $\text{CH}_4 + \text{M} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H} + \text{M}$	17.1	0	88.4
12 $\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	14.1	0	11.9
13 $\text{CH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	3.5	3.08	2.0
14 $\text{CH}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$	13.2	0	9.2
15 $\text{CH}_4 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}_2$	13.3	0	18.0
16 $\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$	13.2	0	0.0
17 $\text{CH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	12.6	0	0.0
18 $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	14.1	0	2.0
19 $\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{O}$	13.4	0	29.0
20 $\text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{HCO}$	10.0	0.5	6.0
21 $\text{CH}_3 + \text{HCO} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{CO}$	11.5	0.5	0.0
22 $\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{O}_2$	12.0	0	0.4
23 $\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$	13.7	0	21.0
24 $\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	12.0	0	6.0
25 $\text{CH}_2\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{HCO} + \text{H} + \text{M}$	16.7	0	72.0
26 $\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	14.7	0	6.3
27 $\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$	12.6	0	3.8
28 $\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{HCO} + \text{OH}$	13.7	0	4.6
29 $\text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}_2$	12.0	0	8.0
30 $\text{HCO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	14.0	0	0.0
31 $\text{HCO} + \text{M} \rightarrow \text{H} + \text{CO} + \text{M}$	14.2	0	19.0
32 $\text{HCO} + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	14.3	0	0.0
33 $\text{HCO} + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$	14.0	0	0.0
34 $\text{HCO} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{O}_2$	14.0	0	3.0
35 $\text{HCO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{HO}_2$	12.5	0	7.0
36 $\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	7.1	1.3	-0.8
37 $\text{CO} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{OH}$	14.0	0	23.0
38 $\text{CO} + \text{O} + \text{M} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{M}$	15.8	0	4.1
39 $\text{CO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{O}_2$	12.4	0	43.8
40 $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{OH}$	14.3	0	16.8
41 $\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{OH}$	10.3	1	8.9
42 $\text{H}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	13.5	0	18.4
43 $\text{H}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{OH}$	14.0	0	20.3
44 $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	13.0	0	1.8
45 $\text{H}_2\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{H} + \text{OH} + \text{M}$	16.3	0	105.1
46 $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$	15.2	0	-1.0
47 $\text{HO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	13.7	0	1.0
48 $\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	14.4	0	1.9
49 $\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	13.4	0	0.7
50 $\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	13.7	0	1.0
51 $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{HO}_2$	13.6	0	42.6
52 $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	17.1	0	45.5
53 $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{H}_2$	12.2	0	3.8
54 $\text{O} + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{OH} + \text{M}$	16.0	0	0.0
55 $\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{M}$	15.7	0	115.0
56 $\text{H}_2 + \text{M} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{M}$	14.3	0	96.0
57 $\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{CH}_3$	19.4	-1	88.3
58 $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_4$	-0.3	4	8.3
59 $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	2.7	3.5	5.2
60 $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	13.8	0	2.4
61 $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{OH}$	13.4	0	6.4
62 $\text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	13.6	0	38.0
63 $\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{HO}_2$	12.0	0	5.0
64 $\text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_4$	17.5	0	35.6
65 $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{HCO}$	13.0	0	1.1
66 $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{M} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} + \text{M}$	17.6	0	98.2
67 $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	13.8	0	6.0
68 $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	14.0	0	3.5
69 $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_2$	13.4	0	5.0
70 $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{M} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} + \text{M}$	16.5	0	40.5
71 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{M} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H} + \text{M}$	14.0	0	114.0
72 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{HCO}$	12.6	0	28.0
73 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2$	14.3	0	19.0
74 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O}$	12.8	0	7.0
75 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{OH}$	15.5	-0.6	17.0
76 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	13.8	0	4.0
77 $\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{CO}$	13.0	0	7.0
78 $\text{C}_2\text{H} + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{CH}$	13.7	0	0.0
79 $\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{OH}$	14.0	0	3.7
80 $\text{CH}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CH} + \text{OH}$	11.3	0.68	25.0
81 $\text{CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	11.4	0.67	25.7
82 $\text{CH}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2\text{O}$	11.4	0.67	25.7
83 $\text{CH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$	11.1	0.67	25.7
84 $\text{CH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{O}$	13.0	0	0.0

FIG. 4.1 – Schéma cinétique d'oxydation du méthanol détaillé: 84 réactions pour 26 espèces, d'après [108]

4.1.2 Généralisation des équations locales pour les milieux homogènes aux milieux à deux phases liquide et gaz

Les équations exactes pour un milieu homogène s'obtiennent en considérant un volume de contrôle \mathcal{V} . Ce volume de contrôle est entouré d'une surface \mathcal{A} fixe dans l'espace.

Soit une quantité F , répartie en chaque point de l'espace comme une quantité volumique f . Son taux de production par unité de volume et de temps est W_f . Le flux de F entrant par unité de surface et de temps en chaque point de surface \mathcal{A} est le vecteur de flux J_f que multiplie la normale à la surface n . Le bilan de F s'écrit alors sur le volume \mathcal{V} comme:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} f d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} W_f d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{A}} \vec{J}_f \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (4.2)$$

En utilisant le théorème de la divergence on transforme l'intégrale de surface en une intégrale de volume. D'autre part le milieu est homogène et la fonction f est dérivable partout dans le domaine \mathcal{V} . Comme la surface \mathcal{A} est fixe on peut passer la dérivée sous l'intégrale et on obtient finalement:

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial f}{\partial t} d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} W_f d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_f d\mathcal{V} \quad (4.3)$$

Cette équation est vraie quelque soit le volume, donc, d'après le lemme fondamentale, on obtient l'équation de bilan locale pour la grandeur f :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_f = W_f \quad (4.4)$$

Considérons maintenant le cas où le volume de contrôle contient une interface liquide-gaz \mathcal{S} . Le champ de f , tel que la masse volumique, présente une discontinuité au niveau de l'interface. Ces fonctions sont continues et dérivables partout au sens des fonctions usuelles, sauf sur un espace de mesure nulle: la surface de discontinuité. On peut alors considérer les distributions associées. Soit \mathcal{F} la distribution associée à f et $\vec{J}_{\mathcal{F}}$ la distribution associée à \vec{J}_f . Soit la fonction de Dirac caractérisant la surface, $\delta_{\mathcal{S}}$. Cette fonction est nulle partout sauf sur la surface où elle n'est pas définie. De plus si on considère une variable ϕ définie sur tout l'espace et ayant pour valeur $\phi_{\mathcal{S}}$ à la surface, on a:

$$\int_{\mathcal{V}} \phi \delta_{\mathcal{S}} d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{S}} \phi_{\mathcal{S}} d\mathcal{S} \quad (4.5)$$

Les dérivées de distribution peuvent alors se réécrire d'après la théorie des distributions [94, 93] en fonction d'un terme de saut plus les dérivées correspondantes prises au sens usuel. La notation suivante: $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^u$, signifie que l'on prend la dérivée entre parenthèses au sens usuel.

Nous obtenons alors:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)^u - f |_{\mathcal{S}^-}^{\mathcal{S}^+} \vec{U}_{\mathcal{S}} \cdot \vec{n} \delta_{\mathcal{S}}, \quad (4.6)$$

où

- $f |_{\mathcal{S}^-}^{\mathcal{S}^+} = f^+ - f^-$ est le saut de la variable f lors de la traversée de l'interface dans le sens de la normale à la surface;
- n est la normale à la surface;
- $U_{\mathcal{S}}$ est la vitesse de la surface \mathcal{S} .

On a aussi:

$$\vec{\nabla} \vec{J}_{\mathcal{F}} = \left(\vec{\nabla} \vec{J}_f \right)^u + \vec{J}_f |_{S_-^{S+}} \cdot \vec{n} \delta_S, \quad (4.7)$$

et

$$\Delta \mathcal{F} = (\Delta f)^u + \left(\vec{\nabla} f \right) |_{S_-^{S+}} \cdot \vec{n} \delta_S + \vec{\nabla} \cdot \left(f |_{S_-^{S+}} \cdot \vec{n} \delta_S \right) \quad (4.8)$$

Pour établir maintenant les équations de bilan qui nous intéressent, dans un milieu diphasique, il faut préciser la définition des différentes masses volumiques:

1. la masse volumique ρ_g est une fonction de la position et du temps telle que:

$$\begin{cases} \rho_g = \text{masse volumique des gaz, si on est dans du gaz;} \\ \rho_g = 0, \text{ sinon.} \end{cases} \quad \text{On va l'appeler masse volumique des gaz.}$$

2. la masse volumique du liquide:

$$\begin{cases} \rho_l = \text{masse volumique du liquide, si on est dans du liquide;} \\ \rho_l = 0, \text{ sinon.} \end{cases}$$

3. la masse volumique totale:

$$\begin{cases} \rho_t = \rho_l, \text{ masse volumique du liquide, si on est dans du liquide;} \\ \rho_t = \rho_g, \text{ masse volumique des gaz, si on est dans du gaz.} \end{cases}$$

On applique alors les équations de dérivation pour les distributions à la masse volumique des gaz ρ_g telle qu'elle est définie précédemment. Le flux J_{ρ_g} est le flux de masse de gaz par unité de surface et de temps:

$$\vec{J}_{\rho_g} = \rho_g \vec{u}_g, \quad (4.9)$$

où u_g est la vitesse locale du gaz. On peut alors écrire les dérivées des distributions correspondant à la masse volumique des gaz et en appliquant les formules de dérivations, on a:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha \rho_g}{\partial x_\alpha} = \underbrace{\left(\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha \rho_g}{\partial x_\alpha} \right)^u}_{=0 \text{ d'après (4.1)}} + \underbrace{\rho_g \left(\vec{U}_S - \vec{u}_{gS} \right) \cdot \vec{n} \delta_S}_{W_{vap}}, \quad (4.10)$$

où W_{vap} correspond à la production de masse de gaz par vaporisation.

On voit apparaître la différence de vitesse entre la surface et le gaz, c'est la vitesse de vaporisation dans les gaz: $\vec{u}_g^{vap} = \vec{U}_S - \vec{u}_{gS}$. On aurait pu considérer la masse volumique de liquide ρ_l , ce qui aurait donné: $\vec{u}_l^{vap} = \vec{U}_S - \vec{u}_{lS}$. Le produit de la masse volumique par la vitesse de vaporisation est le flux de masse vaporisé par unité de surface et de temps. Comme il n'y a pas de production de matière à la surface ce flux est constant de part et d'autre de la surface: $\rho_g \vec{u}_g^{vap} \cdot \vec{n} = \rho_l \vec{u}_l^{vap} \cdot \vec{n} = \dot{m}^{vap}$. La forme taux de vaporisation est naturelle, et aurait pu être donnée directement.

$$W^{vap} = \dot{m}^{vap} \delta_S = \rho_g \vec{u}_g^{vap} \cdot \vec{n} \delta_S \quad (4.11)$$

Notons que ceci nous renseigne sur la forme du taux de vaporisation mais ne nous permet pas de déterminer \vec{u}^{vap} qui reste une inconnue du problème et qu'il faut déterminer par ailleurs, voir (4.20).

L'équation de continuité locale (4.10) est donc exacte au sens des distributions et correspond à la formulation intégrale sur un volume \mathcal{V} fixé de surface \mathcal{A} et contenant une surface de séparation liquide-gaz \mathcal{S} :

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \rho_g d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{A}} \rho_g \vec{u}_g \cdot \vec{n} d\mathcal{A} = \int_{\mathcal{V}} W_{\rho_g} d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{S}} \rho_g \vec{u}_g^{vap} \cdot \vec{n} d\mathcal{S} \quad (4.12)$$

C'est cette dernière équation qui est utilisée pour l'intégration numérique des équations en utilisant par exemple la méthode des volumes finis, l'équation locale (4.10) n'est pas utilisable numériquement à cause du $\delta_{\mathcal{S}}$.

La description complète d'un milieu à deux phases séparées par une interface peut alors s'écrire formellement comme un ensemble d'équations locales. Elles contiennent en plus des termes de production localisés sur la surface, ils correspondent aux sauts des variables lorsque celles-ci n'y sont pas continues. Ces termes de production sont proportionnels à une fonction de Dirac caractérisant la surface.

On peut alors choisir si l'on va décrire le milieu à l'aide de variables pour chaque phase telles que ρ_g et ρ_l ou des variables totales telles que ρ_t . La deuxième approche nous permet de garder le même nombre d'équations. Et les termes de productions dus aux discontinuités, tel que le taux de vaporisation, disparaissent. Cependant il faudra donner une nouvelle équation d'état car le milieu n'est généralement ni complètement un gaz, ni complètement un liquide. Il faudra alors ajouter une nouvelle variable qui correspondra à la proportion massique ou volumique de liquide dans le mélange.

De toute façon on peut écrire des équations de bilan locales pour chaque type de variable au sens des distributions. Par exemple pour le bilan de masse on a:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g u_{\alpha}^g}{\partial x_{\alpha}} = W_{vap} = \rho_g \vec{u}_g^{vap} \cdot \vec{n} \delta_{\mathcal{S}} ; \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l u_{\alpha}^l}{\partial x_{\alpha}} = -W_{vap} = \rho_l \vec{u}_l^{vap} \cdot \vec{n} \delta_{\mathcal{S}} ; \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho_t u_{\alpha}^t}{\partial x_{\alpha}} = 0 \quad . \quad (4.15)$$

Le taux de vaporisation pour la masse volumique totale est nul car le flux de masse perdu par la partie liquide est compensé par le flux de masse gagné par la partie gazeuse, donc la masse volumique totale reste inchangée.

On peut généraliser de la même façon les autres équations pour la partie gazeuse. On obtient ainsi les lois de conservation pour les espèces qui n'existent que sous forme gazeuse dans notre problème, c'est-à-dire dont le taux de vaporisation est nul:

$$\frac{\partial \rho_g Y_i^g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g u_{\alpha}^g Y_i^g}{\partial x_{\alpha}} = \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i^g}{\partial x_{\alpha}} \right) + \underbrace{\rho_g \omega_{c_i} + Y_i^g \rho_g \vec{u}_{vap}^g \cdot \vec{n} \delta_{\mathcal{S}} - \rho_g D_i \left(\frac{\partial Y_i^g}{\partial x_{\alpha}} \right)_g n_{\alpha} \delta_{\mathcal{S}}}_{=W_i^{vap}=0} \quad (4.16)$$

La somme des sauts au niveau de la surface \mathcal{S} est nulle car le taux de vaporisation est nul pour ces espèces, donc:

$$Y_i^g \rho_g u_{vap}^g - \rho_g D_i \left(\frac{\partial Y_i^g}{\partial n} \right)_{\mathcal{S}} = 0. \quad (4.17)$$

Pour l'espèce correspondant à la vapeur du liquide, ici le fuel, on a :

$$\frac{\partial \rho_g Y_f^g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g u_\alpha^g Y_f^g}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D_f \frac{\partial Y_f^g}{\partial x_\alpha} \right) + \rho_g \omega_{c_f} + W_{vap} \quad (4.18)$$

et à la surface on a la condition :

$$Y_f^g \rho_g \vec{u}_{vap}^g \cdot \vec{n} \delta_S - \rho_g D_f \left(\frac{\partial Y_f^g}{\partial x_\alpha} \right) n_\alpha \delta_S = W_{vap} = \rho_g \vec{u}_{vap}^g \cdot \vec{n} \delta_S. \quad (4.19)$$

Ceci permet d'exprimer u_{vap}^g comme une fonction du flux de diffusion et de la valeur Y_f^g prise à la surface :

$$u_{vap}^g = \left(\frac{D_f \left(\frac{\partial Y_f^g}{\partial n} \right)}{1 - Y_f^g} \right)_S. \quad (4.20)$$

On a supposé que le liquide ne contient que la seule espèce fuel et que la dissolution ou diffusion des autres gaz dans le liquide est nulle. Cette équation ne permet pas encore de connaître la valeur de la vitesse de vaporisation car il manque une équation pour calculer Y_f^g , (voir [4.1.3]).

L'équation pour la quantité de mouvement dans les gaz comprend deux nouvelles contributions dues à la surface :

1. T_β composante de la traînée dans la direction α :

$$T_\beta = \left(\tau_{\beta\alpha}^g n_\alpha - p^g n_\beta \right) \delta_S; \quad (4.21)$$

2. un terme qui comprend la quantité de mouvement apportée par la vapeur qui sort de la surface avec la vitesse \vec{u}_{vap}^g et qui est proportionnel au taux de vaporisation :

$$W_g^{vap} u_\beta = u_\beta \left(\rho_g \vec{u}_{vap}^g \cdot \vec{n} \delta_S \right). \quad (4.22)$$

Le bilan de la quantité de mouvement, sans force de volume, s'écrit alors localement et au sens des distributions, avec les nouveaux termes :

$$\frac{\partial \rho_g u_\beta^g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g u_\alpha^g u_\beta^g}{\partial x_\alpha} = - \frac{\partial p^g}{\partial x_\beta} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\tau_{\alpha\beta}^g \right) + \rho_g G_\beta + T_\beta + W_{vap} u_\beta \quad (4.23)$$

L'équation de l'énergie en supposant des vitesses suffisamment faibles avec les mêmes hypothèses que dans (4.1.1) contient trois nouveaux termes :

1. Q_g flux de chaleur qui traverse la surface, dans le cas $\mathcal{L}e = 1$:

$$Q_g = D_h^g \frac{\partial h^g}{\partial x_\alpha} \cdot n_\alpha \delta_S; \quad (4.24)$$

2. un terme qui comprend l'enthalpie emportée par la vapeur qui sort de la surface avec la vitesse u_{vap}^g et qui est proportionnel au taux de vaporisation :

$$W_{vap} h_f^g = h_f^g \left(\rho_g \vec{u}_{vap}^g \cdot \vec{n} \delta_S \right); \quad (4.25)$$

3. un terme lié à la discontinuité de la fonction pression des gaz au travers de l'interface:

$$\mathcal{P}_g = p^g \rho_g \vec{U}_S \cdot \vec{n} \delta_S . \quad (4.26)$$

Finalement on a:

$$\frac{\partial \rho_g h_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g u_\alpha^g h_g}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(D_g \frac{\partial h_g}{\partial x_\alpha} \right) + \frac{\partial p^g}{\partial t} + Q_g + W_{vap} h_f^g + \mathcal{P}_g .$$

Ici p^g est la fonction égale à la pression dans les gaz et nulle dans le liquide. On aurait obtenu de la même façon les équations pour les quantités liées au liquide et pour les quantités totales. Dans les équations pour u_β^l , en négligeant la capillarité, on a le même terme T_β , mais avec le signe moins, car $\tau_{\beta\alpha}^l = \tau_{\beta\alpha}^g$ et $p^l = p^g$ alors que la normale change de sens. Dans les équations pour la quantité de mouvement totale, on n'a ni T_β ni W_{vap} . On peut rajouter la capillarité et alors on a la pression totale discontinue et il reste dans l'équation de la quantité de mouvement totale $\frac{2\sigma}{r} \delta_S$, car $p^l = p^g + \frac{2\sigma}{r} \delta_S$, ici σ est la tension de surface. Si on écrit l'équation pour $h^l = e^l + \frac{p^l}{\rho_l}$, on a encore un terme $-Q_l$ et un terme $-W_{vap} h_f^l$. Mais ici, on doit avoir:

$$Q_g + W_{vap} h_f^g = Q_l + W_{vap} h_f^l, \quad (4.27)$$

et comme $h^l = h_f^g + L_v$, on a $Q_g - Q_l = W_{vap} L_v$ (et non $Q_g = Q_l$). Il reste maintenant à exprimer le taux de vaporisation.

4.1.3 Le taux de vaporisation

Il faut avoir une équation supplémentaire pour décrire la vaporisation à la surface du liquide. Si la pression est inférieure à la pression critique du fluide liquide et que de plus la température du liquide est inférieure à sa température d'ébullition, la pression partielle de vapeur à la surface a à l'équilibre une valeur donnée par la formule de Clapeyron. Nous supposons que la vaporisation est suffisamment rapide pour qu'à tout moment nous ayons atteint cette valeur d'équilibre. De cette façon nous obtenons la valeur de la pression partielle de vapeur à la surface:

$$p_v = p_0 \exp \left(\frac{L_v}{R_0} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right), \quad (4.28)$$

où

- p_v est la pression partielle de vapeur
- L_v est la chaleur latente de vaporisation;
- p_0 la pression de vapeur de référence pour une valeur de température donnée: T_0 .

En divisant par la pression totale du gaz à la surface, p , on obtient:

$$\frac{p_v}{p} = \frac{p_0}{p} \exp \left(\frac{L_v}{R_0} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right). \quad (4.29)$$

La loi des gaz parfaits nous donne: $p_i = \rho_i \frac{R_0}{\mathcal{M}_i} T$,

où

- \mathcal{M}_i la masse molaire pour l'espèce i ;

- R_0 est la constante des gaz parfaits.

De même pour l'ensemble des espèces gazeuses on a:

$$p = \rho_g \frac{R_0}{\mathcal{M}_g} T. \quad (4.30)$$

Comme p est aussi égal à la somme des pressions partielles, on a:

$$p = \sum_i p_i = \sum_i \frac{\rho_i}{\mathcal{M}_i} R_0 T, \quad (4.31)$$

ce qui donne:

$$\frac{1}{\mathcal{M}_g} = \sum_i \frac{\rho_i}{\rho_g} \frac{1}{\mathcal{M}_i} = \sum_i \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i}. \quad (4.32)$$

En remplaçant dans 4.28, on obtient une équation pour la fraction massique de vapeur Y_S à la surface :

$$\frac{Y_S}{\mathcal{M}_v} = \sum_i \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i} \frac{p_0}{p_S} \exp\left(\frac{L_v}{R_0} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T_S}\right)\right). \quad (4.33)$$

Finalement:

$$Y_S = \frac{\mathcal{M}_v \sum_{i \neq f} \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i} \frac{p_0}{p_S} \exp\left(\frac{L_v}{R_0} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T_S}\right)\right)}{\left(1 - \frac{p_0}{p_S} \exp\left(\frac{L_v}{R_0} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T_S}\right)\right)\right)} \quad (4.34)$$

Nous avons alors $Y_S = Y_S(p_S, T_S, Y_i(i \neq v))$, en prenant

- T_S est la température à la surface du liquide et p_S la pression (dans les gaz);
- tous les $Y_i(i \neq f)$ sont pris à la surface;
- l'indice f indique l'espèce fuel qui est la seule espèce qui peut être liquide.

Cette équation (4.34) et l'équation (4.20) nous permettent de calculer la vitesse de vaporisation u_{vap} . En effet p_S peut être connue grâce à l'équation de quantité de mouvement des gaz et T_S grâce à l'équation pour l'énergie dans les gaz et le liquide. Cette vitesse n'est pas une caractéristique intrinsèque, elle dépend de la configuration de l'écoulement autour de la surface, car elle est directement proportionnelle au gradient de la fraction massique de fuel gazeux à la surface.

Ce couplage entre la vitesse de vaporisation et l'écoulement impose de fortes contraintes en résolution spatiale et temporelle pour pouvoir calculer localement la position de l'interface et des gradients normaux à l'interface, lorsque celle-ci est très courbée ...

4.1.4 La variable de mélange Z

On utilise, du point de vue de la combustion, deux variables pour représenter l'état chimique du milieu:

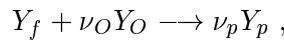
- une variable d'avancement qui indique la proportion de gaz ayant déjà brûlé, généralement notée: c ;
- une variable qui indique la richesse du milieu généralement notée: Z .

La variable d'avancement est utilisée principalement pour les flammes de prémélange à richesse fixée ($Z = \text{constante}$). Dans ce cas elle est une combinaison linéaire des fractions massiques décrivant le problème. On peut la définir par exemple comme:

$$c = \frac{Y_f - Y_f^u(Z)}{Y_f^b(Z) - Y_f^u(Z)}, \quad (4.35)$$

où la fraction massique de fuel $Y_f^u(Z)$ est la valeur avant combustion et $Y_f^b(Z)$ est la valeur après combustion. Ces valeurs sont des fonctions de Z uniquement, donc quand la richesse est constante ce sont des constantes également.

La variable de mélange n'est pas affectée par la ou les réactions chimiques c'est pourquoi on l'appelle aussi scalaire inerte. Supposons que pour un milieu purement gazeux la chimie soit représentée par le schéma à une réaction suivant:



où ν_O et ν_p sont des coefficients stœchiométriques massiques.

Si l'on impose seulement que la variable de mélange soit indépendante de la réaction chimique il y a plusieurs définitions possibles de cette variable, par exemple:

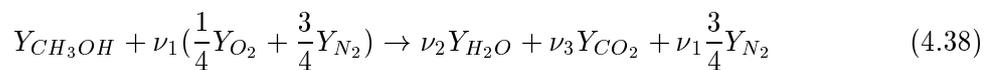
$$Z = Y_f - \frac{1}{\nu_O} Y_O. \quad (4.36)$$

Ainsi définie, cette variable est appelée variable de Zeldovitch. De cette manière en notant le taux de réaction chimique du fuel ' ω_f ', nous aurons le taux de production chimique d'oxydant égal à ' $\nu_O \omega_f$ '. Nous obtenons alors l'équation pour Z à partir des équations pour Y_f et Y_O :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho Y_f}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Y_f}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Y_f}{\partial x_\alpha} \right) + \rho \omega_f \\ + \frac{1}{\nu_O} \times & \frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Y_O}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Y_O}{\partial x_\alpha} \right) - \nu_O \rho \omega_f \\ = & \frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) \end{aligned} \quad (4.37)$$

Il existe d'autre façon de définir Z : pour chaque espèce il suffit d'écrire une combinaison des fractions massiques des produits et des réactifs telle que l'espèce se conserve à travers la réaction chimique.

Si nous considérons l'équation de combustion du méthanol dans de l'air, nous aurons:



Voici quelques façons de définir une variable de mélange:

- $Z = Y_{CH_3OH} - \frac{4}{\nu_1} Y_{O_2}$ (Zeldovitch)
- $Z = Y_{O_2} + \frac{\nu_1}{8\nu_2} Y_{H_2O} + \frac{\nu_1}{8\nu_3} Y_{CO_2}$ (conservation de l'oxygène)
- $Z = Y_{N_2}$ (conservation de l'azote)

De cette façon toutes les définitions des variables de mélange mènent à la même équation. Cependant si on veut qu'elles soient toutes identiques il faut qu'elles aient en plus les mêmes conditions aux limites. Pour cela on définit une seule variable de mélange en imposant qu'elle soit comprise dans l'intervalle $[0, 1]$. De plus on impose qu'elle soit égale à 0 dans l'oxydant et 1 dans le fuel pur. Par exemple à partir de la variable reposant sur l'azote définie précédemment, on obtient la variable de mélange normée $Z^* = 1.d0 - \frac{4}{3}Y_{N_2}$. Plus généralement on considère une variable ϕ combinaison linéaire des fractions massiques des espèces et invariante vis à vis de la réaction chimique:

$$\phi = \sum_{i \neq f} \alpha_i Y_i + \alpha_f Y_f, \quad (4.39)$$

on a alors:

$$Z = \frac{\phi - \phi_O}{\phi_f - \phi_O}, \quad (4.40)$$

où ϕ_f est la valeur de ϕ dans le fuel pur et ϕ_O est la valeur de ϕ dans l'oxydant. Remarquons que dans le fuel pur $Y_i = 0$ si $i \neq f$ et $Y_f = 1$, donc $\phi_f = \alpha_f$.

Pour un milieu diphasique on considère l'équation de Z qui est vraie presque partout et on utilise les formules de dérivations pour la distribution associée:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) = \underbrace{\left(\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) \right)^u}_{=0 \text{ d'après (4.37)}} + Sauts, \quad (4.41)$$

quand ce n'est pas précisé pour un milieu diphasique les quantités sans indice sont prises en phase gazeuse. Les termes de sauts sont:

$$\begin{aligned} &= ZW^{vap} - \rho D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) n \\ &= \frac{1}{\phi_f - \phi_O} \left(\sum_{i \neq f} \alpha_i \left(\underbrace{Y_i W^{vap} - \rho D \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} \right) n}_{=0 \text{ d'après (4.17)}} \right) + \phi_f \left(\underbrace{Y_f W^{vap} - \rho D \left(\frac{\partial Y_f}{\partial x_\alpha} \right) n}_{=W^{vap} \text{ d'après (4.18)}} \right) - \phi_O W^{vap} \right) \\ &= \frac{\phi_f - \phi_O}{\phi_f - \phi_O} W^{vap}. \end{aligned}$$

Finalement en gardant la même définition de Z que dans le cas purement gazeux, les termes de sauts à la surface pour l'équation de Z se réduisent à:

$$Sauts = W^{vap} \text{ (qui contiennent } \delta_S), \quad (4.42)$$

et l'équation de Z dans le cas diphasique devient:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) + W^{vap}. \quad (4.43)$$

Quelle que soit la combinaison choisie pour construire Z , son équation, ses conditions aux limites et ses termes de sauts sont les mêmes. Donc toutes les façons de calculer Z sont équivalentes même dans le cas diphasique. Ainsi cette variable garde toutes ses propriétés, elle est unique et invariante vis à vis du taux de réaction chimique. Cependant, dans le cas diphasique elle varie avec le taux de vaporisation, il faudra donc en tenir compte.

4.2 Description statistique moyenne d'un milieu turbulent diphasique

4.2.1 Utilisation des équations locales dans le cas d'un spray turbulent

Cas d'un calcul complexe

Les équations instantanées précédentes nous permettent de décrire un fluide diphasique réactif localement. Cependant leur résolution ne peut pas se faire, généralement, de façon analytique. Ceci rend obligatoire l'utilisation de méthodes numériques d'intégrations, telle que la méthode de volumes finis, pour les résoudre. Dans la majorité des cas la raideur des gradients ou simplement la dispersion du liquide sous forme de spray nécessiteraient des maillages trop important pour envisager une résolution directe. Ce qui est encore plus vrai quand l'écoulement que l'on veut étudier est turbulent. Même quand la résolution directe est envisageable d'un point de vue de capacité de calcul, les conditions aux limites ne sont généralement pas suffisamment bien connues.

Heureusement nous n'avons quasiment jamais besoin de connaître le détail complet de l'écoulement et de ses fluctuations au cours du temps. La plupart du temps la complexité des écoulements réels est telle qu'il ne serait pas possible d'appréhender directement les données exactes de tout l'écoulement. Il faut les retraiter et utiliser leur moyenne, leur écart type etc...

Dès lors il suffit de calculer directement ces caractéristiques moyennes qui varient beaucoup plus doucement et qui ne nécessiteront donc pas des moyens de calcul prohibitifs. Pour cela on assimile les variables réelles à des variables fluctuant aléatoirement autour d'une moyenne qui peut être temporelle si l'écoulement est globalement stationnaire, de volume si l'écoulement est globalement homogène, mais plus généralement il s'agit de la moyenne statistique. On suppose que pour un écoulement turbulent une telle moyenne existe. Les variables aléatoires utilisées ont les mêmes propriétés et statistiques que les variables réelles. Formellement on décompose une variable ϕ en sa valeur moyenne $\bar{\phi}$ que l'on appelle aussi moyenne de Reynolds, et une fluctuation. La moyenne de la fluctuation est zéro. Comme dans les cas qui nous intéressent la masse volumique peut fluctuer, on s'intéresse plutôt à une moyenne pondérée par la masse que l'on appelle la moyenne de Favre, $\tilde{\phi}$, définie par:

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}}. \quad (4.44)$$

Pour obtenir les équations décrivant l'évolution des quantités moyennes il suffit de reprendre les équations des variables exactes et de leur appliquer l'opération de moyenne. Il y a cependant plusieurs approches possibles pour décrire le cas diphasique et nous devons choisir la plus appropriée à notre problème.

Quelle description utiliser pour le cas d'un spray?

Trois méthodes ont été proposées pour décrire un milieu diphasique. Les deux premières sont purement Eulériennes: LHF et 2FE

- Méthode: Locally Homogeneous Fluid (LHF):

Nous supposons que la phase liquide est une espèce supplémentaire. Il sera donc nécessaire d'écrire une équation de plus pour la fraction massique de liquide ou la fraction volumique de liquide. Nous représentons les deux phases comme un seul fluide, c'est-à-dire à partir des équations instantanées totales, qu'il faudra moyenner. Ce type d'approche globale

nous permet de gagner en simplicité puisque l'on ne résout qu'une seule des trois équations possibles, dans le cas diphasique, pour chaque variable. Cependant le fluide que nous considérons est très particulier, ses propriétés sont à la fois celles d'un liquide et celles d'un gaz. Elles vont dépendre du taux de liquide qu'il contient. Par exemple l'équation d'état devra varier entre celle d'un gaz, si la concentration locale de liquide est zéro, et celle d'un liquide si cette concentration est un.

Une autre difficulté est de représenter la dispersion du liquide. Le coefficient de diffusion laminaire n'est plus constant et devra dépendre de la quantité de liquide. Le liquide est principalement diffusé par les forces d'inertie quand celles-ci ont un caractère aléatoire, (turbulence) ce qui est le cas dans presque tous les processus d'injection. Même si on suppose que la diffusion sera de même nature que la diffusion turbulente pour un mélange de deux gaz, il faut tenir compte du rapport des masses volumiques très différent de un. De plus il est probable qu'aux petites échelles ou si les forces d'inertie sont faibles, la tension de surface intervient en jouant un rôle de 'diffusion négative' qui n'existe pas dans un milieu purement gazeux.

– Méthode : Eulérienne à deux Fluides (2FE):

Nous regardons les deux phases comme des fluides différents et nous les décrivons de façon Eulérienne. On utilise alors les équations pour le liquide et les équations pour le gaz. Nous avons une meilleure caractérisation de la phase liquide qui est décrite par des quantités (température, vitesse, masse volumique ...) qui lui sont propres. La modélisation des termes d'échanges entre phase sera plus précise car nous aurons de meilleurs renseignements. Cependant il faut modéliser la dispersion du liquide par rapport à lui même et la connaissance des petites échelles n'est pas améliorée. Cette solution sera donc plus précise mais aussi plus coûteuse puisqu'il faut ajouter une équation de plus pour chaque variable.

La dernière méthode consiste en une approche mixte eulérienne-lagrangienne c'est la méthode SEL.

– Méthode : Stastistique Eulérienne-Lagrangienne méthode (SEL)[1]:

Nous considérons aussi les deux phases séparément, la phase gazeuse est décrite de façon eulérienne avec les équations pour le gaz. La phase liquide est décrite de façon lagrangienne. Cette méthode est appliquée en prenant comme particule fluide pour représenter le liquide des gouttes. On suppose donc que tout le liquide est sous forme de goutte et on tire partie de cette hypothèse pour éviter de décrire les mouvements à l'intérieur du liquide. Cette méthode est amenée à donner de bons résultats pour une phase liquide déjà séparée en petites particules assez nombreuses.

Si nous étions capables de modéliser correctement tous les termes inconnus qui vont se présenter dans le développement de ces méthodes, celles-ci devraient être toutes équivalentes et donner le même résultat. Néanmoins suivant les cas les difficultés que l'on rencontrera lors de la modélisation seront plus ou moins grandes et donc les erreurs seront minimisées si la méthode correspond à l'écoulement.

Par exemple lors de l'atomisation primaire le liquide est composé de grandes parcelles de liquide non assimilables à des gouttes. La dernière approche ne semble donc pas la plus adéquate, il vaut mieux utiliser une méthode Eulérienne comme dans [100].

Par contre pour un spray où le liquide est constitué de gouttelettes qui se vaporisent, il paraît naturel de représenter la partie liquide sous forme lagrangienne où les particules correspondent à des gouttelettes. C'est cette méthode qui a été implémentée dans le code KIVA II que nous nous proposons d'utiliser [3]. Comme la position du liquide n'est pas exactement connue et que le milieu est turbulent on ne cherchera pas à connaître le mouvement et la position de chacune des gouttes. On utilisera une représentation stochastique du spray où chaque particule représentera un certain nombre de gouttes identiques.

Nous utiliserons donc les équations Eulériennes locales de la partie gazeuse qu'il faudra moyenner et une méthode Lagrangienne stochastique pour la partie liquide.

4.2.2 Les équations moyennes pour la phase gazeuse

Nous utilisons les équations de la phase gazeuse déterminées précédemment [4.1.2]. Afin de ne pas alourdir les notations, nous n'utiliserons pas toujours l'indice g pour désigner une variable du gaz, par convention, si une variable n'est pas indiquée c'est une variable du gaz. On définit la variable ω_v comme le taux de vaporisation W_{vap} divisé par la masse volumique des gaz ρ_g :

$$\omega_v = \frac{W_{vap}}{\rho_g} = \vec{u}_g^{vap} \cdot \vec{n} \delta_S. \quad (4.45)$$

On considère que chaque particule stochastique k décrivant le spray contribue au flux de vaporisation total moyen par un petit débit de fuel vaporisé $\dot{m}^{(k)}$. La moyenne du taux de vaporisation devient la somme de toutes les contributions des particules présentes à l'endroit considéré, divisé par le volume considéré \mathcal{V} :

$$\overline{\rho\omega_v} = \overline{\rho}\widetilde{\omega_v} = \sum_k^{k=1,n} \frac{\dot{m}^{(k)}}{\mathcal{V}}. \quad (4.46)$$

De même on considère les contributions individuelles des particules stochastiques aux termes d'échanges moyens entre phase:

- la traînée des gouttes représentées par la particule k : $T_\beta^{(k)}$;
- le flux de chaleur entre les gouttes de la particule k et le gaz: $Q^{(k)}$;
- le terme lié à la discontinuité de la fonction pression dans les gaz au travers de la surface des gouttes de la particule k : $\mathcal{P}^{(k)}$.

Nous aurons aussi besoin de connaître $u_\beta^{(k)}$ la composante de vitesse d'une particule k dans la direction β .

On obtient alors les équations pour les quantités moyennes à partir des équations locales pour le gaz de [4.1.2]:

- Equation de continuité

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{u_\alpha \bar{p}}}{\partial x_\alpha} = \overline{\rho}\widetilde{\omega_v} = \sum_k^{k=1,n} \frac{\dot{m}^{(k)}}{\mathcal{V}}$$

– Equation pour les espèces 'i' qui ne sont pas la vapeur de fuel:

$$\frac{\partial \widetilde{\rho Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u}_\alpha \widetilde{Y}_i}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(D \frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{\partial \widetilde{\rho u}_\alpha' \widetilde{Y}_i'}{\partial x_\alpha} + \widetilde{\rho \omega}_{c_i}$$

– Equation pour le fuel gazeux:

$$\frac{\partial \widetilde{\rho Y}_f}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u}_\alpha \widetilde{Y}_f}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(D \frac{\partial \widetilde{Y}_f}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{\partial \widetilde{\rho u}_\alpha' \widetilde{Y}_f'}{\partial x_\alpha} + \widetilde{\rho \omega}_{c_f} + \sum_k^{k=1,n} \frac{\dot{m}^{(k)}}{\mathcal{V}}$$

– Equation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \widetilde{\rho u}_\beta}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u}_\alpha \widetilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} = - \frac{\partial \widetilde{p}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \widetilde{\tau}_{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial \widetilde{\rho u}_\alpha' u_\beta'}{\partial x_\alpha} + \widetilde{\rho G}_\beta + \sum_k^{k=1,n} \left(\frac{T_\beta^{(k)}}{\mathcal{V}} + \frac{\dot{m}^{(k)} u_\beta^{(k)}}{\mathcal{V}} \right)$$

– Equation de l'énergie

$$\frac{\partial \widetilde{\rho h}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u}_\alpha \widetilde{h}}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(D \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_\alpha} \right) + \frac{\partial \widetilde{p}}{\partial t} - \frac{\partial \widetilde{\rho u}_\alpha' \widetilde{h}'}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k^{k=1,n} \left(Q^{(k)} + \dot{m}^{(k)} h_f^{(k)} + \mathcal{P}^{(k)} \right)$$

Nous avons ainsi obtenu un système d'équation qui décrit l'évolution des moyennes. Cependant les termes qui dans les équations locales étaient non linéaires ne s'écrivent pas directement en fonction des moyennes. Ce sont de nouvelles inconnues qui expriment le rôle des fluctuations locales dans les équations d'évolution moyennées. Il faut trouver des façons d'écrire ces termes, comme des fonctions de ce que l'on connaît, c'est-à-dire des grandeurs moyennes.

Pour chacun de ces termes non fermés, de nombreux modèles ont été proposés qui fonctionnent plus ou moins bien suivant les cas et de nombreuses équipes travaillent encore à leur amélioration. Nous allons particulièrement étudier les termes liés à la chimie et aux interactions dues aux sprays. Pour les autres termes nous utiliserons des modèles largement employés ayant un bon rapport 'qualité-difficulté'.

Le terme de corrélation de vitesse est le premier terme directement lié à la turbulence, qu'il nous faut modéliser, il est appelé tenseur de Reynolds: $\widetilde{\rho u'_\alpha u'_\beta}$. On remarque que la turbulence a pour action principale le mélange par un transport aléatoire dû aux fluctuations de vitesses, ce qui fait penser à une sorte de diffusion des quantités moyennes. Alors par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses on modélise ce terme de la façon suivante:

$$\widetilde{\rho u'_\alpha u'_\beta} = \widetilde{\rho \nu}_t \left(\left(\frac{\partial \widetilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \widetilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \widetilde{u}_\gamma}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha,\beta} \right) + \frac{1}{3} \widetilde{u_\gamma u_\gamma} \delta_{\alpha,\beta},$$

où

– les termes contenant le symbole de kronecker : $\delta_{\alpha,\beta}$ viennent de la conservation du tenseur par contraction des indices;

– il apparait un terme qui n'est pas fermé lui non plus: $\frac{\widetilde{u'_\beta u'_\beta}}{2}$. C'est l'énergie cinétique des fluctuations de vitesse de la turbulence que nous notons aussi 'k';

- par analogie avec le cas laminaire nous avons : $\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho}$ et ν_t est appelé viscosité turbulente.

Il reste donc à modéliser ν_t , qui peut être pris comme un scalaire ou un tenseur, et l'énergie turbulente k .

Nous utiliserons le modèle classique ' $k - \varepsilon$ ', ε étant la dissipation de l'énergie turbulente, terme qui apparaît quand on écrit l'équation pour k : $\varepsilon = \nu \frac{\partial u'_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial u'_\alpha}{\partial x_\beta}$.

A partir de k et ε on modélise la viscosité turbulente ν_t :

$$\mu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon},$$

où C_μ est une constante estimée empiriquement égale à : 0.09 .

Toutes les équations pour les scalaires contiennent un terme de transport par les fluctuations de vitesse de type $\widetilde{u'_\alpha \phi'}$. En suivant l'idée que l'effet de ce transport est une diffusion des valeurs moyennes nous utiliserons la fermeture par gradient :

$$\widetilde{u'_\alpha \phi'} \rightarrow -D_{t_\phi} \frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial x_\alpha},$$

où

- D_{t_ϕ} est le coefficient de diffusion turbulente de la quantité ϕ : $D_{t_\phi} = \frac{\nu_t}{Sc_{t_\phi}}$;
- Sc_{t_ϕ} est le nombre de Schmidt turbulent de la quantité ϕ .

Cette fermeture est très employée, elle donne des résultats satisfaisants du moment que l'effet de diffusion à contre gradient, mis en évidence dans [22], reste négligeable. De même pour les autres variables nous obtenons :

$$\frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha h'}}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\overline{\rho} D_{t_h} \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_\alpha} \right)$$

et

$$\frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha Y'_i}}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\overline{\rho} D_{t_{Y_i}} \frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial x_\alpha} \right)$$

Le modèle $k - \varepsilon$ ne prend pas en compte originalement l'effet de la présence des gouttes. Dans le cas diphasique l'équation pour k , voir annexe [4.3.1] fait apparaître en plus des termes habituels un groupe de termes sources liés à la présence des gouttes :

- des termes liés aux forces de traînée :

$$\overline{u_\beta T_\beta} - \widetilde{u_\beta} \overline{T_\beta} \tag{4.47}$$

- et des termes liés au flux de quantité de mouvement apporté par la masse de fuel qui s'évapore :

$$\frac{1}{2} \overline{u_\beta u_\beta W_{vap}} - \widetilde{u_\beta} \overline{u_\beta W_{vap}} + \frac{1}{2} \widetilde{u_\beta} \widetilde{u_\beta} \overline{W_{vap}}. \tag{4.48}$$

Les fermetures classiques pour le modèle $k - \varepsilon$ [63] sont utilisées dans KIVA II pour tout ce qui n'est pas dû aux gouttes. Il est probable que l'effet des termes de traînée est important si les gouttes ont beaucoup d'inertie. On peut imaginer que, quand une goutte a trop d'inertie pour suivre exactement les mouvements du gaz elle laisse derrière elle un sillage qui peut être turbulent. A la limite un champ de gouttes très inertes à travers lequel on ferait passer un courant gazeux peut jouer le rôle d'une grille. Ce terme est pris en compte dans KIVA II dans l'équation k de la façon suivante, exacte:

$$\overline{u_\beta T_\beta} - \widetilde{u_\beta T_\beta} \rightarrow \sum_k^{k=1,n} \left(\frac{(u_\beta^{(k)} - \widetilde{u}_\beta) T_\beta^{(k)}}{\mathcal{V}} \right). \quad (4.49)$$

Il faut aussi donner le pendant de ce terme pour l'équation de la dissipation ε . Pour cela on multiplie le terme de l'équation pour k par $C \frac{\varepsilon}{k}$, Le problème est de déterminer la constante C . Pour le terme de traînée la constante C est estimée à : 1,50 en se basant sur la conservation de l'échelle des longueurs lors des interactions spray/turbulence [82]. Par contre les termes dus à la vaporisation ont été négligés. Leur modélisation dans l'équation pour k ne pose cependant pas de problème:

$$\frac{1}{2} \overline{u_\beta u_\beta W_{vap}} - \widetilde{u_\beta u_\beta W_{vap}} + \frac{1}{2} \widetilde{u_\beta u_\beta W_{vap}} \rightarrow \frac{1}{2} \sum_k^{k=1,n} \left(\frac{(u_\beta^{(k)} - \widetilde{u}_\beta)^2 \dot{m}^{(k)}}{\mathcal{V}} \right). \quad (4.50)$$

Il faut encore trouver le terme équivalent pour l'équation de ε . On peut encore utiliser celui de l'équation de k et le multiplier par $C_v \frac{\varepsilon}{k}$. La constante de C_v devra être déterminée par comparaison avec des expériences. Cela n'ayant pas encore été fait nous nous contenterons de la modélisation traditionnelle qui néglige les termes dus à la vaporisation.

Finalement pour obtenir un système fermé d'équation il nous reste, d'une part à calculer les termes d'indice supérieur $^{(k)}$ portés par les particules stochastiques et d'autre part à modéliser le terme de réaction chimique, c'est le but du prochain chapitre.

4.3 Annexe

4.3.1 Annexe pour le calcul de l'équation de l'énergie cinétique turbulente k

On utilise l'équation de u_β (ici sans les forces de volume):

$$\frac{\partial \rho u_\beta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial p}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \tau_{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha} + T_\beta + W_{vap} u_\beta \quad (4.51)$$

et de \widetilde{u}_β :

$$\frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_\beta}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_\alpha \widetilde{u}_\beta}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha \widetilde{u}'_\beta}}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \overline{\tau_{\alpha\beta}}}{\partial x_\alpha} + \overline{T_\beta} + \overline{W_{vap} u_\beta}. \quad (4.52)$$

On multiplie l'équation (4.51) par u_β et on applique l'opération de moyenne de manière à obtenir une équation pour $\widetilde{u}_\beta \widetilde{u}_\beta$. D'un autre côté on multiplie l'équation (4.52) par \widetilde{u}_β pour obtenir une équation pour $\widetilde{u}_\beta \widetilde{u}_\beta$. La différence de ces deux équations nous donne une équation pour $\widetilde{u}'_\beta \widetilde{u}'_\beta = k$ l'énergie cinétique de turbulence.

Terme d'accumulation et terme de convection

De (4.51) on a en multipliant par u_β :

$$\begin{aligned} & u_\beta \left(\frac{\partial \rho u_\beta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \\ &= \rho u_\beta \frac{\partial u_\beta}{\partial t} + \rho u_\alpha u_\beta \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + u_\beta^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\rho \frac{\partial u_\beta^2}{\partial t} + \rho u_\alpha \frac{\partial u_\beta^2}{\partial x_\alpha} + 2u_\beta^2 W_{vap} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \rho u_\beta^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta^2}{\partial x_\alpha} - u_\beta^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) + 2u_\beta^2 W_{vap} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \rho u_\beta^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta^2}{\partial x_\alpha} + u_\beta^2 W_{vap} \right). \end{aligned}$$

La moyenne de ces termes donne:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_\beta^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_\alpha \widetilde{u}_\beta^2}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha \widetilde{u}'_\beta^2}}{\partial x_\alpha} + \overline{u_\beta^2 W_{vap}} \right). \quad (4.53)$$

De (4.52) on a en multipliant par \widetilde{u}_β et en prenant en compte le tenseur de Reynolds:

$$\begin{aligned} & \widetilde{u}_\beta \left(\frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_\beta}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_\alpha \widetilde{u}_\beta}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha \widetilde{u}'_\beta}}{\partial x_\alpha} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_\beta \widetilde{u}_\beta}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_\alpha \widetilde{u}_\beta \widetilde{u}_\beta}}{\partial x_\alpha} + \overline{\widetilde{u}_\beta \widetilde{u}_\beta \overline{W_{vap}}} + 2\widetilde{u}_\beta \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha \widetilde{u}'_\beta}}{\partial x_\alpha} \right). \end{aligned}$$

La différence des deux équations nous donne:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}'_\beta^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}'_\alpha \widetilde{u}'_\beta^2}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha \widetilde{u}'_\beta^2}}{\partial x_\alpha} + \overline{u_\beta^2 W_{vap}} - \overline{\widetilde{u}_\beta \widetilde{u}_\beta \overline{W_{vap}}} - 2\widetilde{u}_\beta \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha \widetilde{u}'_\beta}}{\partial x_\alpha} \right).$$

D'autre part:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta}}{\partial x_\alpha} - 2 \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta}}{\partial x_\alpha} \\
= & \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'^2_\beta}}{\partial x_\alpha} + 2 \frac{\partial \overline{\rho u'_\beta u'_\alpha u'_\beta}}{\partial x_\alpha} - 2 \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta}}{\partial x_\alpha} \\
= & \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'^2_\beta}}{\partial x_\alpha} + 2 \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \overline{u'_\beta}}{\partial x_\alpha} + 2 \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta}}{\partial x_\alpha} - 2 \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta}}{\partial x_\alpha} \\
= & \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'^2_\beta}}{\partial x_\alpha} + 2 \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \overline{u'_\beta}}{\partial x_\alpha}
\end{aligned}$$

Finalement les termes d'accumulation et de convection donnent:

$$\frac{\partial \overline{\rho \frac{u'^2_\beta}{2}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha \frac{u'^2_\beta}{2}}}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'^2_\beta}}{\partial x_\alpha} + \overline{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \overline{u'_\beta}}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{2} \left(\overline{u'^2_\beta W_{vap}} - \overline{u'_\beta u'_\beta W_{vap}} \right) \quad (4.54)$$

Terme de pression

Le terme de pression conduit à:

$$\begin{aligned}
& \overline{u_\beta \times \left(-\frac{\partial p}{\partial x_\beta} \right)} - \overline{u'_\beta \times \left(-\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_\alpha} \right)} \\
= & -\overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_\alpha} - \overline{u'_\beta} \frac{\partial p}{\partial x_\beta} + \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_\alpha} \\
= & -\overline{u'_\beta} \frac{\partial p'}{\partial x_\beta} - \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_\beta} \\
= & -\overline{\frac{\partial u'_\beta p'}{\partial x_\beta}} + \overline{p' \frac{\partial u'_\beta}{\partial x_\beta}} - \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_\beta}.
\end{aligned}$$

Terme $\tau_{\alpha\beta}$

Le terme $\tau_{\alpha\beta}$ conduit à:

$$\begin{aligned}
& \overline{u_\beta \times \left(\frac{\partial \tau_{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha} \right)} - \overline{u'_\beta \times \left(\frac{\partial \overline{\tau_{\alpha\beta}}}{\partial x_\alpha} \right)} \\
= & \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{\tau_{\alpha\beta}}}{\partial x_\alpha} + \overline{u'_\beta} \frac{\partial \tau_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} - \overline{u'_\beta} \frac{\partial \overline{\tau_{\alpha\beta}}}{\partial x_\alpha} \\
= & \frac{\partial \overline{u'_\beta \tau_{\alpha\beta}}}{\partial x_\alpha} - \overline{\tau_{\alpha\beta}} \frac{\partial \overline{u'_\beta}}{\partial x_\alpha}.
\end{aligned}$$

Termes dus aux échanges de quantité de mouvement avec les gouttes

Les termes de traînées et de vaporisation donnent:

$$\begin{aligned}
& \overline{u_\beta \times (T_\beta + W_{vap} u_\beta)} - \overline{u'_\beta \times (T_\beta + W_{vap} u_\beta)} \\
= & \overline{u'_\beta T_\beta} + \overline{u'_\beta u_\beta W_{vap}} - \overline{u'_\beta T_\beta} - \overline{u'_\beta u_\beta W_{vap}}.
\end{aligned}$$

Equation finale non modélisée pour $k = \frac{u'_\beta u'_\beta}{2}$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \overline{\rho \frac{u'^2_\beta}{2}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_\alpha \frac{u'^2_\beta}{2}}}{\partial x_\alpha} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha u'^2_\beta}}{\partial x_\alpha} - \overline{\rho u'_\alpha \tilde{u}'_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} \\
&\quad - \frac{\overline{\partial u'_\beta p'}}{\partial x_\beta} + \overline{p' \frac{\partial u'_\beta}{\partial x_\beta}} - \overline{u'_\beta \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_\beta}} \\
&\quad + \frac{\overline{\partial u'_\beta \tau_{\alpha\beta}}}{\partial x_\alpha} - \overline{\tau_{\alpha\beta} \frac{\partial u'_\beta}{\partial x_\alpha}} \\
&\quad + \overline{u_\beta T_\beta} - \overline{\tilde{u}_\beta T_\beta} \\
&\quad + \frac{1}{2} \overline{u_\beta u_\beta W_{vap}} - \overline{\tilde{u}_\beta u_\beta W_{vap}} + \frac{1}{2} \overline{\tilde{u}_\beta \tilde{u}_\beta W_{vap}}
\end{aligned}$$

Chapitre 5

Modélisation

Ce chapitre est dédié aux termes non fermés, dus au spray et à la chimie, qui apparaissent dans les équations moyennes. Il est possible d'utiliser, grâce à la méthode stochastique Lagrangienne utilisée pour décrire le liquide, les résultats obtenus pour les termes d'échanges à la surface d'une goutte de liquide. Il reste alors à modéliser le terme de réaction chimique moyen. Plusieurs méthodes existent, qui nécessitent la connaissance de la statistique de la variable Z dans un milieu diphasique. Il reste ensuite à relier cette variable aux autres pour décrire complètement le milieu.

5.1 Les termes de flux moyen à travers l'interface liquide - gaz

5.1.1 Termes d'échanges entre phases pour une goutte seule dans un écoulement simple

Grâce à la description Lagrangienne de la phase liquide on reporte le problème de fermeture des termes moyens liés au spray [4.2.2], comme l'évaporation, la traînée, l'échange d'énergie, au niveau de chaque particule individuellement. Les termes d'échanges moyennés sur une maille de calcul sont simplement la somme des contributions de chaque particule. Pour connaître les forces de traînées, le flux de vaporisation et le flux de chaleur ou encore la température de chaque particule nous supposons que les particules sont des gouttes sphériques. Nous allons dans cette partie calculer les termes d'échanges entre phases pour une goutte seule dans un écoulement simplifié.

Cas d'une goutte isolée s'évaporant seule dans une atmosphère oxydante et immobile

Les premières études qui ont été menées pour décrire la combustion d'un spray, ont été faites sur une goutte isolée brûlant dans une atmosphère oxydante [48], [97] et [51]. Pour une goutte seule, en supposant que le problème est quasistationnaire et de symétrie sphérique, nous pouvons résoudre analytiquement les équations exactes qui décrivent le gaz autour de la goutte. Des expériences sur des gouttes suspendues à un fil de quartz ou en chute libre, ou encore, sur des sphères poreuses dans lesquelles est injecté un certain débit de fuel en continu ont été effectuées, par exemple [113]. Elles correspondent assez bien à ces hypothèses et permettent de vérifier les résultats théoriques.

Nous nous intéresserons au cas d'une goutte qui s'évapore mais nous ne supposons pas qu'elle est entourée d'une flamme. Une théorie tout à fait semblable peut être faite

pour ce second cas. Les résultats obtenus concernant l'évaporation sont bien vérifiés par l'expérience, ce qui n'est pas tout à fait le cas de la combustion notamment en ce qui concerne l'emplacement de la flamme, voir [64]. C'est un des défauts, le plus visible, de l'hypothèse de quasi stationnarité. De plus, bien que dans certains cas la combustion d'un spray présente bien des gouttes ayant chacune une flamme autour d'elle ce n'est pas le cas général, et la flamme se situe plus généralement à une certaine distance de groupes de gouttes.

Nous assimilerons les gouttes à des sphères de liquide, cela suppose que les gouttes ne sont pas trop déformées par les forces d'inertie. On peut utiliser le nombre de Weber pour mesurer le rapport des forces d'inertie qui tendent à déformer la goutte sur les forces de tension de surface qui tendent à maintenir sa symétrie sphérique:

$$W_e = \frac{|u_g - u_d| \rho_g d_d}{\sigma}, \quad (5.1)$$

où l'indice $_d$ désigne la goutte (drop) pour ne pas confondre avec le gaz et d_d est le diamètre de la goutte. Ce nombre doit être petit, ce qui correspond à l'évaporation d'un spray déjà formé, si au contraire il est grand les gouttes sont sujettes à des déformations importantes pouvant conduire à leur cassure. On peut supposer le problème quasistationnaire grâce à la grande différence de masse volumique liquide-gaz. La conservation de la masse à la surface des gouttes nous donne:

$$\rho_l u_l = \rho_g u_g$$

et comme $\rho_l \gg \rho_g$ nous avons $u_l \ll u_g$. La vitesse de l'écoulement gazeux u_g induite par l'évaporation ('Stephan flow') est donc très supérieure en valeur absolue à la vitesse de diminution du rayon de la goutte u_l . On peut alors supposer que l'on est très proche du cas réellement stationnaire où le rayon de la goutte ne diminue pas.

Nous pouvons alors écrire les équations qui ne décrivent que la phase gazeuse et où la surface de la goutte est considérée comme une condition limite. En utilisant la variable de mélange Z précédemment définie [4.1.4], on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{d\dot{m}}{dr} &= 0 \\ \frac{d\dot{m}Z}{dr} &= \frac{d}{dr} \left(4\pi\rho D r^2 \frac{dZ}{dr} \right) \\ \frac{d\dot{m}h}{dr} &= \frac{d}{dr} \left(4\pi\rho D r^2 \frac{dh}{dr} \right) \end{aligned}$$

où

- $\dot{m} = 4\pi r^2 \rho u$ est le débit qui est donc constant;
- u est la vitesse radiale des gaz;
- le nombre de Lewis est pris égal à un.

Il reste à écrire les conditions aux limites c'est-à-dire en $+\infty$ et en $r = r_d$, rayon de la goutte. Pour simplifier les calculs, mais on peut généraliser, on suppose que la capacité calorifique des gaz ne dépend pas de la température, et que le gaz ne contient que de la vapeur de fuel et de l'oxydant.

En $+\infty$:

- $H^\infty = c_p T^\infty + Y_o^\infty Q_o^0 + Y_f^\infty Q_f^0$ ce qui traduit que l'enthalpie tend quand on s'éloigne de la surface de la goutte vers celle du gaz à l'infini. La variable Q_i^0 est la chaleur de formation de l'espèce i à 0 degrés Kelvin.
- Z^∞ est donné et correspond à une valeur de Y_f^∞ et de Y_o^∞ qui sont les fractions massiques de fuel et d'oxydant dans le gaz en $+\infty$.

A la surface, nous supposons que l'oxydant ne se dilue pas dans le liquide de la goutte. Le flux de Z y est donc équivalent au flux de combustible vaporisé. Comme le débit de fuel vaporisé qui sort de la goutte: \dot{m} , est égal à la quantité de fuel emportée par diffusion et par convection. L'intégration de l'équation de Z nous donne :

$$\dot{m}Z - 4\pi r^2 \rho D \frac{dZ}{dr} = \dot{m}$$

Pour l'enthalpie la surface de la goutte joue à la fois le rôle d'un puits et d'une source d'enthalpie. L'équation pour h mène à:

$$\dot{m}c_p T - 4\pi r^2 \rho D \frac{dc_p T}{dr} + \dot{m}Y_f Q_f^0 - 4\pi r^2 \rho D \frac{dY_f Q_f^0}{dr} + \dot{m}Y_o Q_o^0 - 4\pi r^2 \rho D \frac{dY_o Q_o^0}{dr} = \text{constante}$$

La constante vient de l'intégration et on la détermine en appliquant cette équation à la surface de la goutte :

- Les deux premiers termes représentent la différence de quantité de chaleur emportée par la convection dans les gaz, moins la quantité de chaleur apportée à la surface par diffusion. Ce qui est égal à la quantité de chaleur qui sort de la goutte: $\dot{m}c_p T_s$, moins ce qui entre dans la goutte :
 - Une partie sert à l'évaporation : $-\dot{m}L_v$ (où L_v est la chaleur latente de vaporisation);
 - Une partie sert à chauffer la goutte: ϕ_s .
- Les deux termes suivants représentent la somme des chaleurs de formation de fuel vapeur emportée par convection et diffusion, ce qui est égal à ce qui sort de la surface: $\dot{m}Y_f Q_f^0$.
- Les deux derniers termes représentent la différence entre la chaleur de formation de l'oxydant convectée et celle diffusée. Comme l'espèce oxydant ne traverse pas la surface cette différence est nulle .

En résumé nous avons donc :

$$\dot{m}h - 4\pi r^2 \rho D \frac{dh}{dr} = \dot{m}c_p T_s - (\dot{m}L_v + \phi_s) + \dot{m}Q_f^0 = \dot{m}A$$

Pour plus de commodité nous avons noté le terme de gauche $\dot{m}A$. Notons que si nous appelons $h_l^s = c_p T^s + Q_l^0$, l'enthalpie du liquide à la surface, nous avons $\dot{m}A = \dot{m}h_l^s - \phi_s$. Nous vérifions bien que la goutte est à la fois une source d'enthalpie et un puits de chaleur. En intégrant ces deux équations et en utilisant les conditions aux limites en $+\infty$ nous obtenons :

$$\ln \left(\frac{1 - Z}{1 - Z_\infty} \right) = -\frac{\dot{m}}{4\pi\rho Dr}$$

et

$$\ln \left(\frac{A - h}{A - h_\infty} \right) = -\frac{\dot{m}}{4\pi\rho Dr}$$

Pour finir on applique les conditions limites à la surface de la goutte, en $r = r_d$, $Z = Z^s$, $h = h^s$, $Y_f = Y_f^s$, $Y_o = Y_o^s$. Nous déduisons des équations ci-dessus, le débit massique en fonction du paramètre de transfert de Spalding: B .

$$\dot{m} = 4\pi\rho Dr_d \ln(1 + B) \quad (5.2)$$

Nous pourrions réécrire ce genre d'équation pour les fractions massiques d'oxydant et de vapeur, et ainsi faire réapparaître le paramètre de transfert de Spalding, nous aurions :

$$B = \frac{Z^s - Z^\infty}{1 - Z^s} = \frac{h^s - h^\infty}{A - h^s} = \frac{Y_f^s - Y_f^\infty}{1 - Y_f^s} = \frac{Y_o^\infty - Y_o^s}{Y_o^s} \quad (5.3)(a, b, c, d)$$

Il nous faut encore déterminer ϕ_s (qui intervient dans A) et Y_f^s pour fermer le problème. ϕ_s est la quantité de chaleur apportée par le gaz pour réchauffer le liquide de sa température initiale T^0 à la température de surface T^s . Nous pouvons décrire deux cas limites, une où la goutte chauffe, presque toute l'énergie apportée est consommée par ϕ_s et le débit est faible. Et l'autre où le débit vaporisé est fort, l'énergie apportée est consommée en grande majorité par la vaporisation. Une comparaison des différents cas possibles est disponible dans [64]. Pour ne pas résoudre toute la mécanique des fluides à l'intérieur de la goutte nous pouvons supposer que le liquide a une température uniforme. Cela peut être justifié si les échanges de chaleur à l'intérieur de la goutte sont forts (si le coefficient de diffusivité tend vers l'infini ou s'il y a des recirculations internes du liquide). Dans ce cas nous pouvons écrire :

$$\phi_s = \frac{4}{3}\pi r_s^3 \rho_l c_{p_l} \frac{dT_s}{dt} \quad (5.4)$$

Il faut aussi définir Y_f^s , on utilise la formule de Clayperon d'équilibre de vaporisation, qui relie Y_f^s et T_s , comme au [4.1.3]. Finalement Y_f^s, T_s et Φ_s sont calculées simultanément par (5.1.1)(c), (5.4) et la formule de Clapeyron. On retrouve ici la loi classique du ' d_r^2 ' qui exprime que la décroissance du carré du diamètre de la goutte est constante. Pour cela on dérive la masse de liquide contenu dans la goutte en fonction du temps qui est égal à $-\dot{m}$:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3}\pi\rho_l r_d^3 \right) = \frac{\pi\rho_l d_d^2}{2} \frac{dd_d}{dt} = -\dot{m}.$$

Ce qui nous donne en simplifiant et en réintégrant:

$$\frac{d}{dt} \left(d_r^2 \right) = -8 \frac{\rho}{\rho_l} D \ln(1 + B).$$

Nous pouvons maintenant décrire l'évaporation d'une goutte seule dans une atmosphère oxydante infinie et immobile. Mais dans notre cas la goutte n'est pas seule et il nous faut prendre en compte les effets de la turbulence.

Cas d'une goutte isolée dans un écoulement d'air

Dans le cas général les gaz qui entourent la goutte ne sont pas immobiles, c'est le deuxième problème qu'il nous faut traiter : le cas des gouttes en convection forcée. Ceci peut être dû soit à des mouvements de grande taille de la goutte par rapport aux gaz, soit à la turbulence à échelle petite par rapport à celle de la goutte qui règne dans le milieu.

Le taux de vaporisation est lui affecté par l'écoulement gazeux autour de la goutte, puisque celui-ci augmente la dispersion de la vapeur. Nous utiliserons la corrélation de Frössling [40] pour la convection forcée due aux mouvements de taille supérieure à la goutte:

$$\dot{m} = 4\rho_g \pi \frac{\lambda}{c_p} r \ln \left(1 + \frac{Y_v^s - Y_v^\infty}{1 - Y_v^s} \right) \left(2 + 0.55 \mathcal{R}e^{\frac{1}{2}} \mathcal{P}r^{\frac{1}{3}} \right) \quad (5.5)$$

où :

– $\mathcal{P}r = \frac{\nu}{\alpha}$ est le nombre de Prandtl.

Cette modélisation est discutée plus en détails dans [37].

Dans le second cas il suffit de transposer la loi du d^2 en mettant une diffusivité thermique turbulente au lieu de $\frac{\lambda}{\rho_g c_p}$. Cet effet est en général faible car la taille des gouttes est très proche de la plus petite échelle de la turbulence ...

Ensuite il nous faut tenir compte du terme d'échange de quantité de mouvement dû à la traînée des gouttes. Pour cela nous considérerons la goutte comme une sphère solide. En négligeant l'effet de la vaporisation et du flux de matière induit sur la traînée et en supposant que le nombre de Reynolds de la goutte est petit nous obtenons la loi de Stokes pour une sphère :

$$T_\beta = \frac{1}{2} \rho C_D \pi r^2 \left(u_\beta - u_\beta^d \right) \left| u_\beta - u_\beta^d \right|, \quad (5.6)$$

où u_β^d est la vitesse de la goutte considérée.

Le coefficient de traînée est :

$$C_D = \frac{24}{\mathcal{R}e_d},$$

où $\mathcal{R}e_d$ est le nombre de Reynolds de la goutte :

$$\mathcal{R}e_d = \frac{\left| u_\beta - u_\beta^d \right| r_d}{\nu}.$$

Ce résultat peut se retrouver par exemple dans [19]. Il est démontré pour un écoulement 'rampant', et reste valide pour des nombres de Reynolds proche de l'unité.

Mais dans notre cas le nombre de Reynolds est souvent bien plus élevé. Nous supposons que nous pouvons utiliser quand même la forme précédente qui a le mérite, quand le nombre de Reynolds devient petit, de tendre vers la bonne limite. Cependant pour tenir compte du nombre de Reynolds élevé nous utiliserons un coefficient de traînée modifié tel que :

$$- C_D = \frac{24}{\mathcal{R}e_d} \left(1 + \mathcal{R}e_d^{\frac{2}{3}} \right) \text{ si } \mathcal{R}e_d < 1000$$

$$- C_D = 0.424 \text{ si } \mathcal{R}e_d > 1000$$

Enfin le terme d'échange de chaleur entre la goutte et le gaz n'est autre que Φ_s , puisque le flux de chaleur autre que Φ_s , qui est reçu par la goutte, est rendu au gaz sous forme de vapeurs.

Finalement nous avons tous les termes d'échange entre phases si le spray n'était composé que d'une goutte dans un écoulement laminaire. Ces résultats vont servir de base à la modélisation des termes moyens dus au spray.

5.1.2 Les interactions moyennes du spray avec la phase gazeuse

En premier lieu, il nous faut ajouter à la description de la section précédente, les interactions dues aux autres gouttes présentes dans le spray car même si elles sont éloignées nous ne pouvons plus parler de milieu infini. Ceci est un problème très complexe, dont la solution approchée, en suivant une proposition de C.K. Law, consiste à utiliser, à la place des valeurs correspondant aux conditions limites à l'infini, les valeurs moyennes dans la cellule de calcul où se situe la goutte. Ceci est quasiment vrai si le milieu est très dilué, c'est-à-dire si la distance inter-gouttes est très supérieure aux rayons des gouttes. En effet, la valeur de la concentration en vapeur diminue quand on s'éloigne de la surface dans la direction radiale. Et donc dès que nous sommes assez loin, la concentration de vapeur du milieu n'est presque plus influencée par la surface de la goutte et reste à peu près constante. Comme le milieu est très dilué il a en majorité cette concentration qui correspond alors à la concentration moyenne, la partie de l'espace proche de la surface étant négligeable.

Nous garderons cependant la même méthode si le milieu n'est pas trop dilué. Dans ce cas le fait de prendre les valeurs moyennes à la place des valeurs en l'infini correspond à un modèle de fermeture visant à prendre en compte une partie des effets due à l'interaction des gouttes entre elles. En effet, le taux de vaporisation croît avec l'augmentation de l'écart entre la fraction massique de vapeur à la surface et à l'infini (voir paramètre de Spalding). Comme nous prenons la valeur moyenne qui est plus grande que la valeur minimale (correspondant à la valeur à l'infini) l'écart diminue entraînant une baisse du taux de vaporisation ce qui va dans le même sens que l'effet produit par l'interaction des gouttes. Le paramètre de Spalding devient donc dans tous les cas :

$$B = \frac{Z^s - Z^\infty}{1 - Z^s} \rightarrow B = \frac{Z^s - \tilde{Z}}{1 - Z^s}.$$

Le second problème est que les gouttes ne sont pas immobiles et l'écoulement n'est pas permanent. Il a été montré expérimentalement [9] qu'une turbulence même avec une vitesse moyenne nulle modifiait fortement le taux de vaporisation d'une goutte seule. Les gouttes subissant un écoulement turbulent voient la vitesse du gaz autour d'elles fluctuer. Selon les cas les gouttes vont plus ou moins bien suivre cet écoulement, nous utiliserons les échelles liées à la goutte et à la turbulence pour les différencier. Les échelles pour la turbulence sont les échelles de temps et d'espace, intégrale ou de Kolmogorov respectivement : τ_t, l_t ou τ_k, l_k . Comme échelle pour la goutte nous avons pour l'espace r_d le rayon de la goutte et un temps de réponse de la goutte aux perturbations de vitesse du gaz. Ce temps représente le temps qu'il faudrait à une goutte pour que sa vitesse passe de zéro à V_0 , où V_0 est la vitesse de l'écoulement dans laquelle nous plongeons la goutte à l'instant $t = 0$. En appliquant la loi de Stokes nous trouvons $\tau_a = \frac{r_d^2 \rho_l}{\nu \rho_g}$. Ce résultat est cohérent car la viscosité est le moteur de cette adaptation, pour des raisons de dimension nous sommes amenés à utiliser le rayon de la goutte au carré. Le rapport des masses volumiques venant directement de la conservation

de la quantité de mouvement. Il apparaît alors opportun de construire un diagramme ayant $\frac{r_d^2}{l_t^2}$ en abscisse et $\frac{\tau_a}{\tau_t}$ en ordonnée :

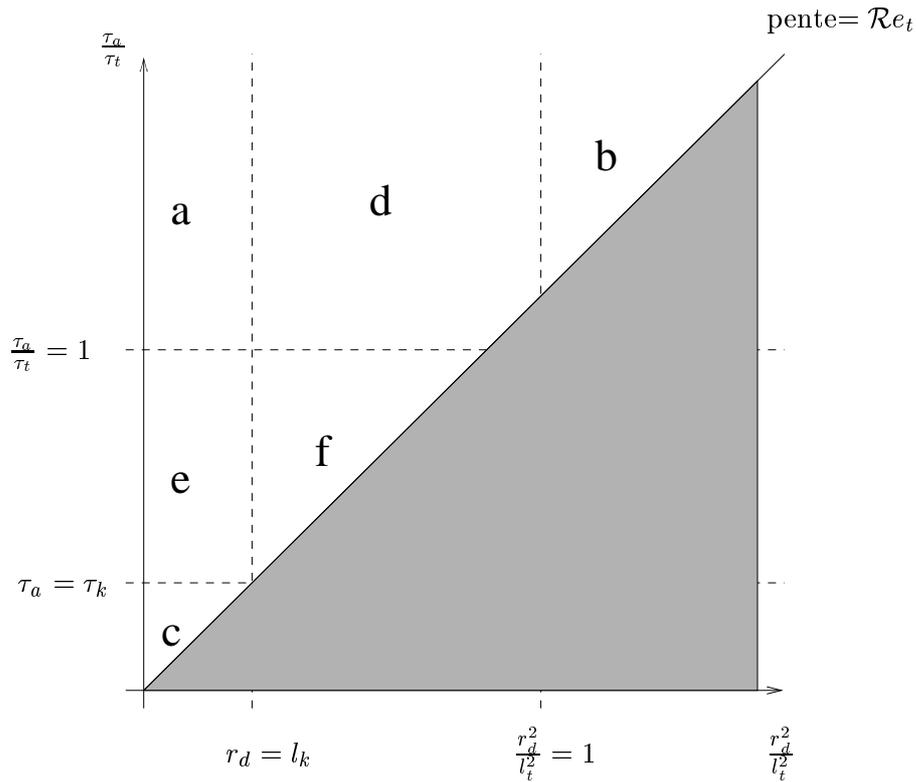


FIG. 5.1 – Différents cas d'interaction entre la turbulence et une goutte en fonction d'une part de son rayon et des échelles spatiales turbulentes, et d'autre part de son temps de réponse aux fluctuations de vitesse. (L'indice k désigne une échelle de Kolmogorov)

La partie grisée de la Figure: 5.1 correspond à $\rho_l < \rho_g$ ce qui n'est pas le cas des gouttes mais plutôt celui des bulles, ce qui sort donc de notre sujet. En effet puisque la densité du liquide est supérieure à celle du gaz:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_l}{\rho_g} &> 1; \\ \frac{\tau_a}{\tau_t} &> \frac{r_d^2}{\nu \tau_t}; \\ \frac{\tau_a}{\tau_t} &> \frac{r_d^2}{l_t^2} \mathcal{R}e_t. \end{aligned}$$

Suivant le diagramme de la Figure: 5.1 nous aurons :

- 'a': Le temps d'adaptation de la goutte est trop grand, elle ne peut pas suivre tous les changements de vitesse dus à la turbulence du gaz qui l'entoure. Comme toutes les échelles spatiales de la turbulence sont plus grandes que la goutte chaque changement de vitesse provoque une convection forcée. La modélisation de ce cas nous conduit donc à utiliser les équations précédentes de convection forcée pour l'évaporation avec une vitesse des gaz aléatoires retraçant la turbulence calculée.

- 'b': La goutte est plus grosse que toutes les échelles spatiales de la turbulence, étant donné le rapport des masses volumiques liquide-gaz le temps d'adaptation de la goutte est plus long que tous les temps de renversement de turbulence. Dans ce cas les tourbillons contribuent aux mélanges à la surface de la goutte. L'action de la turbulence peut alors être représentée par un coefficient de diffusivité turbulente $\frac{\nu_t}{Sc_t}$ à la place du coefficient de diffusion laminaire et en considérant que le gaz autour de la goutte est immobile à l'échelle de la goutte.
- 'c': Ici la goutte est plus petite que toutes les échelles de la turbulence et son temps d'adaptation est très petit. Dans ce cas la goutte ne voit pas la turbulence, elle est convectée par les plus petits tourbillons, ceux de Kolmogorov. L'échelle de Kolmogorov correspond à la longueur sur laquelle l'échange de quantité de mouvement au niveau moléculaire représenté par la viscosité ν permet au milieu de s'adapter à tout instant malgré les perturbations de vitesse. Les échanges de masse auront aussi le temps de se faire et le milieu de s'adapter sur une certaine échelle liée au scalaire, l'échelle de Batchelor: l_b . Dans ce cas il faut utiliser la modélisation de la vaporisation d'une goutte immobile, mais avec comme condition aux limites extérieures, non pas une valeur constante à l'infini mais plutôt une valeur constante à une distance finie donnée, par exemple à une longueur valant l_b de la surface de la goutte. Pour la fraction massique de fuel, la valeur $Y_f^{l_b}$ sera prise de façon aléatoire de telle manière à ce qu'elle décrive la statistique des valeurs instantanées de Y_f dans les gaz, de la même façon que la vitesse au (a). Nous avons alors:

Comme dans [5.1.1], on a:

$$\dot{m}Y_f - 4\pi r^2 \rho \nu \frac{dY_f}{dr} = \dot{m}. \quad (5.7)$$

On intègre cette équation et l'on obtient:

$$-\ln(1 - Y_f) = \frac{\dot{m}}{4\pi\rho\nu r} + C, \quad (5.8)$$

où C est une constante. Elle est déterminée en appliquant la condition limite en $l_b + r_d$, $Y_f = Y_f^{l_b}$:

$$C = -\ln(1 - Y_f^{l_b}) - \frac{\dot{m}}{4\pi\rho\nu(l_b + r_d)}. \quad (5.9)$$

En remplaçant on obtient:

$$\frac{\dot{m}}{4\pi\rho\nu} \frac{l_b}{r(l_b + r_d)} = \ln\left(\frac{1 - Y_f^{l_b}}{1 - Y_f}\right) \quad (5.10)$$

et

$$\frac{\dot{m}}{4\pi\rho} = \nu \frac{r(l_b + r_d)}{l_b} \ln\left(1 + \frac{Y_f - Y_f^{l_b}}{1 - Y_f}\right). \quad (5.11)$$

Finalement on obtient le débit vaporisé par goutte en appliquant l'équation à la surface où la valeur de la fraction massique de fuel est Y_f^s :

$$\frac{\dot{m}}{4\pi\rho} = \nu \frac{r_d(l_b + r_d)}{l_b} \ln \left(1 + \frac{Y_f^s - Y_f^{l_b}}{1 - Y_f^s} \right). \quad (5.12)$$

On peut aussi calculer l'amplitude de la vitesse de vaporisation orthogonalement à la surface qui est reliée au taux de vaporisation pour une goutte par:

$$\dot{m} = 4\rho_g \pi r^2 u_{vap}.$$

On obtient alors:

$$u_{vap} = \frac{\nu(r_d + l_b)}{r_d l_b} \ln \left(1 + \frac{Y_f^s - Y_f^{l_b}}{1 - Y_f^s} \right).$$

Pour la fraction massique de fuel, la valeur $Y_f^{l_b}$ sera prise de façon aléatoire de telle manière à ce qu'elle décrive la statistique des valeurs instantanées de Y_f dans les gaz, de la même façon que la vitesse au (a).

- les cas 'd', 'e', 'f' sont les plus difficiles à traiter car ils tiennent un peu de chacun des cas 'a', 'b', 'c'. Nous pouvons modéliser ces cas en reprenant les modélisations précédentes et en répartissant l'effet de chaque modèle. Par exemple pour 'd' on utilisera la modélisation de type 'a' et 'b'. On peut alors définir une énergie cinétique de turbulence correspondant à des fluctuations d'échelles spatiales plus grandes que le rayon de la goutte $k_{l < r_d}$. Il suffit de couper le spectre et d'intégrer l'énergie pour toutes les fréquences inférieures à $\frac{1}{r_d}$. On pourra alors pondérer le taux de vaporisation dû au modèle (a) par $\frac{k_{l < r_d}}{k}$ et celui du modèle (b) par $\frac{k - k_{l < r_d}}{k}$.

Il n'est cependant pas possible d'appliquer directement ce diagramme pour modéliser le taux de vaporisation car il reste certains problèmes:

- Les raisonnements sur les échelles spatiales sont à une constante multiplicative près et il faudrait fixer ces constantes par comparaison avec des expériences.
- Il faut s'assurer que les caractéristiques de la turbulence prennent bien en compte la présence de gouttes au sein de l'écoulement. Notamment dans le cas 'a' les gouttes vont créer de la turbulence ayant des échelles de leur propre taille et cela peut tendre à faire évoluer le milieu vers le cas 'd' et 'b'.
- Les gouttes évoluent aussi à travers le diagramme quand elles se vaporisent puisque leur rayon diminue, selon des droites $Y = X \mathcal{R}e_t \frac{\mu}{\rho_g}$.

Nous utiliserons la modélisation qui existe dans KIVA. Elle ne prend en compte que le cas (a), mais elle est déjà éprouvée. Il serait intéressant de tester et valider les autres modèles car les gouttes en se vaporisant deviendront de plus en plus petites et sortiront probablement du domaine de validité du modèle (a).

Nous avons maintenant des modèles qui permettent de décrire l'évolution d'une goutte dans le spray qui s'évapore dans un milieu turbulent. On les applique à chaque goutte qui contiennent les particules stochastiques, ce qui permet de résoudre l'équation d'évolution du spray.

5.2 Modélisation du terme de réaction chimique

Il nous reste à exprimer le taux de réaction chimique moyen pour que les équations de [4.2.2] soient fermées complètement. Ce problème existe déjà dans le cas monophasique et de nombreux travaux lui ont été dédiés. Notre but est d'utiliser les approches proposées dans le cas purement gazeux et de les étendre au cas diphasique.

5.2.1 Position du problème

Nous avons représenté l'état du milieu et de ses fluctuations induites par la turbulence et la combustion à gauche pour une flamme prémélangée et à droite pour une flamme de diffusion, Figure: 5.2.

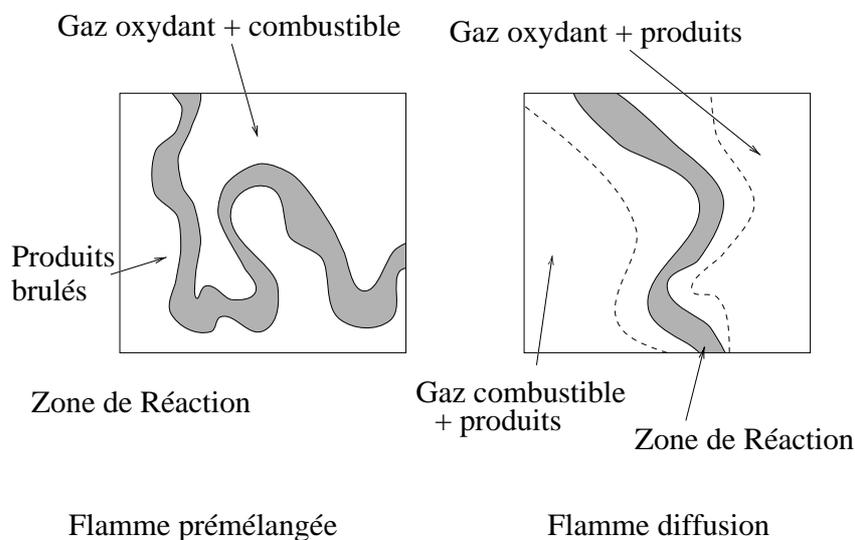


FIG. 5.2 – *Fluctuation de température à l'intérieur d'une maille de calcul*

Les termes de réactions chimiques s'expriment généralement sous la forme d'une loi d'Arrhenius. Les premières tentatives de simulation ont utilisé directement les valeurs moyennes de concentration et de température dans la loi chimique en modifiant les constantes pour tenir compte de la turbulence [83]. Cette loi est très non linéaire notamment en fonction de la température. Ainsi le taux de réaction moyen sera principalement dû aux points chauds qui sont dans la maille. A cause des fluctuations il peut y avoir des points très chauds où le taux de réaction locale est maximum mais avec une température moyenne sur la totalité de la maille assez basse. Dans ce cas l'utilisation de la température moyenne directement dans la loi d'Arrhenius aboutirait à un taux de réaction moyen quasiment nul et à une extinction de la flamme. Il faut tenir compte des points chauds à partir desquels la flamme va se propager.

Le but des modèles de combustion turbulente est de chercher à incorporer les effets de ces fluctuations qui ont lieu à des échelles inférieures à la précision du calcul pour trouver le taux de réaction moyen. Comme on ne connaît que les valeurs moyennes il faut faire des hypothèses supplémentaires ou ajouter de nouvelles variables. La seconde difficulté liée à la combustion diphasique, notamment dans les moteurs Diesel, est que l'on ne peut pas séparer complètement les flammes de diffusion et les flammes de prémélange. Or la plupart des modèles ne traitent que de l'un ou de l'autre type de flamme.

5.2.2 Combustion turbulente en phase purement gazeuse

Le premier modèle proposé par Spalding [96] traite de la combustion turbulente prémélangée. Il fait l'hypothèse que le milieu n'est composé que de poches de gaz frais et de poches de gaz brûlé. C'est alors la turbulence qui, en brisant ces poches et en les mélangeant, provoque la combustion des gaz frais. Les poches sont supposées se briser de la même façon que les tourbillons de vitesse, c'est pourquoi ce modèle s'appelle "Eddy-Break-Up". L'alternance des poches de gaz frais et de gaz brûlé est quantifiée par les fluctuations de fraction massique de fuel: $\widetilde{Y_f'^2}$. L'intensité du mélange est quand à elle représentée par un temps de mélange turbulent: $\tau_{EBU} = \frac{k}{\varepsilon}$. De cette façon le taux de réaction moyen devient:

$$\widetilde{\omega}_{c_f} = C_{EBU} \frac{\sqrt{\widetilde{Y_f'^2}}}{\tau_{EBU}}. \quad (5.13)$$

La constante C_{EBU} est une constante du modèle, elle est de l'ordre de l'unité. Afin d'estimer les fluctuations de Y_f il est possible d'écrire une équation de transport pour $\widetilde{Y_f'^2}$ qu'il faut modéliser. Une première analyse simplifiée permet de les estimer de façon particulièrement simple dans ce cas le modèle devient:

$$\widetilde{\omega}_{c_f} = C_{EBU} \frac{\widetilde{Y_f} (1 - \widetilde{Y_f})}{\tau_{EBU}}. \quad (5.14)$$

Ce modèle montre clairement l'importance des fluctuations et du mélange. En effet, le taux de production chimique n'est contrôlé que par le mélange et plus du tout par les processus chimiques. Cela suppose que dans les gaz frais la température est trop basse pour que la réaction chimique puisse se produire et que la moindre élévation de température par mélange avec des gaz brûlés provoque la réaction instantanée et complète des gaz frais mélangés. Cela veut dire que le temps de mélange est beaucoup plus grand que le temps chimique. Le rapport de ces deux temps forme le nombre de Damköhler: $Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}$. Le temps turbulent τ_t est généralement estimé par $\tau_t = \frac{k}{\varepsilon}$. Le temps chimique τ_c peut avoir plusieurs définitions, il est généralement estimé en utilisant la vitesse u_l et l'épaisseur δ_l de flamme laminaire qui se propagerait dans les gaz frais, alors $\tau_c = \frac{\delta_l}{u_l}$.

L'extension de ce modèle aux flammes de diffusion a été proposé par Magnussen et al [71]. Dans le modèle précédent les fluctuations de concentration de fuel ne pouvaient être dues qu'à la consommation du fuel, donc qu'à la présence de gaz brûlé. Dans le cas des flammes de diffusion elles peuvent être dues aussi à des fluctuations de richesse. Pour tenir compte de cela dans le modèle Eddy-Break-Up les auteurs proposent de remplacer $\widetilde{Y_f'^2}$ par le

minimum de $\left(\widetilde{Y}_f, \frac{\widetilde{Y}_O}{\nu_O}, \frac{\widetilde{Y}_P}{\nu_P}\right)$. Ils obtiennent donc le taux de réaction moyen:

$$\widetilde{\omega}_{c_f} = C \frac{\min\left(\widetilde{Y}_f, \frac{\widetilde{Y}_O}{\nu_O}, \frac{\widetilde{Y}_P}{\nu_P}\right)}{\tau_t}, \quad (5.15)$$

où ν_O et ν_P sont les coefficients stœchiométriques massiques de la réaction:



et C est la constante du modèle. Ainsi que le milieu soit pauvre ou riche c'est la concentration de l'espèce minoritaire qui limite la réaction. De plus il faut qu'il y ait des gaz brûlés pour assurer une température suffisante afin que la réaction chimique puisse se produire.

Ces deux modèles grâce à leur simplicité ont connu un grand succès et sont généralement présents dans les codes industriels. Cependant si le premier modèle est plus ou moins justifié théoriquement, avec des hypothèses restrictives, le second ne l'est pas pour l'instant. De plus leur domaine de validité est limité au nombre de Damköhler très grand. Ceci n'est pas toujours vrai et il est intéressant de prendre aussi en compte les effets de chimie non infiniment rapide. De plus les états possibles du milieu ne sont pas limités aux cas complètement brûlés et totalement inbrûlés, ce qui reviendrait à négliger la zone grise sur la Figure: 5.2. Il existe même des cas où le mélange est beaucoup plus rapide que la réaction chimique; alors la zone grise s'épaissit jusqu'à remplir toute la maille de calcul. Pour finir, le temps qui représente le mélange du scalaire par la turbulence n'est supposé dépendre que des fluctuations de vitesse, or il est très probable qu'il dépende aussi du scalaire lui-même. Des modèles plus complexes vont chercher à prendre en compte ces phénomènes. Des revues générales de tous ces modèles sont disponibles par exemple dans [13], [104], [39]. Deux grandes classes de modèles sont le plus souvent utilisées, ce sont les modèles de type flammelettes et les modèles de type PDF.

Les modèles de type flammelettes reposent sur l'hypothèse que le front de flamme turbulent est composé de flammelettes d'épaisseur petite par rapport à toutes les échelles turbulentes. Cette hypothèse sur les états possibles du milieu réactif permet d'utiliser les résultats obtenus dans des configurations d'écoulements laminaires. Par exemple le taux de réaction de n'importe quelle espèce est calculé dans une flamme laminaire en fonction d'un seul paramètre qui varie au travers de la flamme. Ce paramètre est la variable d'avancement C dans le cas d'une flamme de prémélange ou la variable de mélange Z dans le cas d'une flamme de diffusion. Le type de flamme laminaire peut dépendre aussi d'un autre paramètre, souvent c'est l'étirement qui est relié à la dissipation scalaire χ .

Il existe alors deux méthodes. L'une consiste à calculer le taux de réaction moyen en connaissant la PDF jointe de ces deux paramètres, par exemple:

$$\widetilde{\omega}_c = \int \int \omega_{flammelette}(C, \chi) P(C, \chi) dC d\chi. \quad (5.16)$$

L'autre méthode mesure ou calcule le taux de réaction dans le cas laminaire de chaque espèce en fonction de la quantité de surface de flamme. Le taux de réaction moyen est alors obtenu en multipliant les taux de réaction des flammelettes laminaires par la quantité de flammelettes qu'il y a dans la flamme turbulente:

$$\overline{\rho \widetilde{\omega}_{c_i}} = \overline{\rho} \omega_{flammelette} \overline{\Sigma}. \quad (5.17)$$

La quantité de flammelettes est mesurée grâce à une nouvelle variable: la densité de surface de flamme Σ . L'écriture d'une équation pour cette nouvelle variable a d'abord été proposée par Marble et al [73] en se basant sur des considérations physiques. Depuis de nouvelles approches ont permis d'obtenir une équation exacte pour Σ , mais avec des termes non fermés qui nécessitent des modèles de fermeture basés sur des considérations physiques [17] [99] [103] [101]. Pour obtenir cette équation il faut utiliser la variable qui caractérise la flamme. Par exemple on utilise la variable d'avancement C dans le cas prémélangé, qui a une valeur C^* dans la zone de réaction. Pope [88] relie alors la densité de surface moyenne $\bar{\Sigma}$ à C par:

$$\bar{\Sigma} = \overline{|\Delta C| \delta(C - C^*)} = \overline{|\Delta C|}_{|C^*} P(C^*), \quad (5.18)$$

où $|\Delta C|$ est le module du gradient de C et $p(C^*)$ la probabilité d'avoir C^* . A partir de l'équation locale de C il est possible de trouver l'équation pour $\bar{\Sigma}$ en utilisant une méthode du type de celle utilisée par Lundgren [70] pour le calcul de l'équation de PDF. L'équation ainsi obtenue doit être fermée, de nombreux modèles ont été proposés, une comparaison de leur efficacité est disponible dans [33]. Avec la méthode de densité de surface de flamme il suffit de connaître la valeur de la PDF de C en un seul point C^* pour déterminer le taux de réaction moyen dû au champ de scalaire entier. Dans le cas des flammes de diffusion il faut remplacer le scalaire C par Z .

Dans les deux cas il faut connaître le taux de réaction des flammelettes que l'on rencontre dans la flamme. La configuration de flamme à contre courant est généralement utilisée pour calculer ce taux de réaction laminaire $\omega_{flammelette}$. Il s'agit de deux écoulements à contre courant l'un de l'autre, pour une flamme prémélangée on utilise d'un côté du gaz frais et de l'autre des gaz brûlés et pour une flamme de diffusion on utilise d'un côté un écoulement de combustible et de l'autre côté un écoulement oxydant, Figure: 5.3. Dans les deux cas on obtient une flamme qui se stabilise, si cela est possible, entre les deux écoulements opposés. Cette configuration peut être réalisée expérimentalement ou numériquement avec des schémas cinétiques très complets, elle permet de mesurer le taux de réaction par unité de surface de flamme en fonction de la composition et de la température des gaz non brûlés, mais aussi en fonction de l'étirement que subit la flamme. Le taux d'étirement est l'inverse d'un temps qui vient de la turbulence, ce temps intervient aussi dans l'équation de la surface de flamme, il joue le même rôle que le temps de mélange dans le modèle eddy-break-up et il faut encore le déterminer. Ces modèles supposent donc que la structure interne fine de la flamme turbulente est la même que celle d'une collection de flammelettes laminaires subissant un étirement permanent dans une configuration de flamme à contre courant. Ceci est une hypothèse forte: en effet, il existe aussi des flammelettes à contre courant compressées, des flammelettes courbées, des flammelettes en régime instationnaires. Le fait que seules des flammelettes étirées à contre courant puissent exister en régime stationnaire fait penser qu'elles sont la majorité parmi toutes celles possibles, mais dans le cas où les fréquences temporelles mises en jeu par la turbulence de l'écoulement ne sont pas trop fortes.

La question est donc de savoir si les flammes turbulentes ont toujours cette structure de flamme à flammelettes?

Borghi [10] a proposé un diagramme pour décrire les différents états possibles des flammes turbulentes dans le cas prémélangé [12] et dans le cas des flammes de diffusion, Figure: 5.4. Le nombre de Damköhler pour les flammes de diffusion est calculé avec τ_c qui est un temps chimique correspondant au processus réactionnel global à richesse unité. Le nombre de

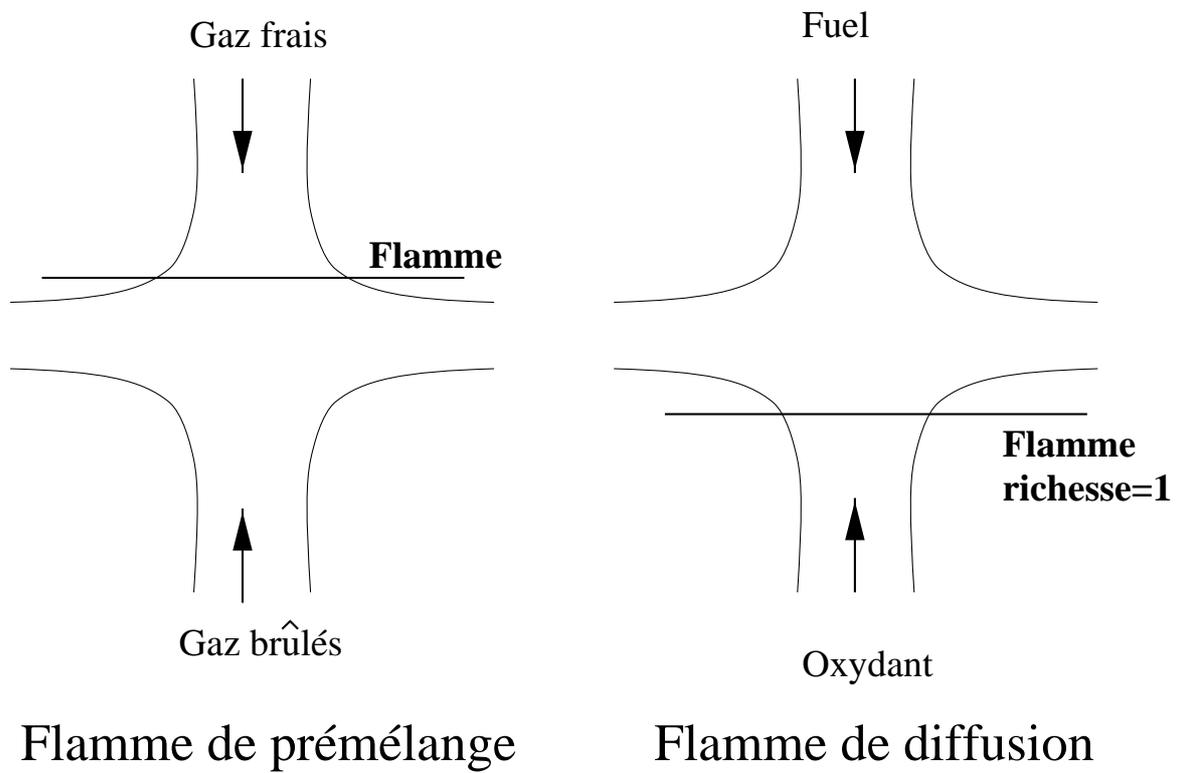


FIG. 5.3 – Configuration de flamme à contre courant, à gauche pour les flammes de prémélange, à droite pour les flammes de diffusion

Reynolds turbulent est défini par:

$$Re_t = \frac{k^{\frac{1}{2}} l_t}{\nu}, \quad (5.19)$$

où l_t est l'échelle intégrale de la turbulence, ν est la viscosité laminaire et k l'énergie cinétique turbulente. En dessous d'un certain nombre de Damköhler le mélange est plus rapide que la chimie, alors les fluctuations de richesse et de température ont le temps de disparaître. Dans ce cas il n'est pas possible de trouver des structures de flammes laminaires. C'est le seul cas où le taux de réaction moyen peut se calculer en introduisant les valeurs moyennes des fractions massiques et de la température directement dans la loi chimique. A l'opposé si le nombre de Damköhler est très grand la réaction chimique est toujours en équilibre. En dessous d'un nombre de Reynolds critique les flammes laminaires sont plissées et étirées, c'est le domaine où l'on peut appliquer les modèles de flammelettes. Au dessus de ce nombre critique la flamme se plisse tellement qu'il y aura des interactions entre les flammelettes. Elles pourront se rejoindre et se recouper, ce qui devrait modifier le taux de réaction locale. Il faut aussi tenir compte de toutes les échelles de la turbulence, quand le nombre de Damköhler diminue peu à peu certaines échelles de temps de la turbulence commencent à interagir avec la flamme, et à l'éteindre localement par étirement. C'est le rôle de la droite limite qui compare le temps chimique aux échelles de temps les plus petites de la turbulence, celles de Kolmogorov qui sont les premières à interagir avec le front de flamme laminaire.

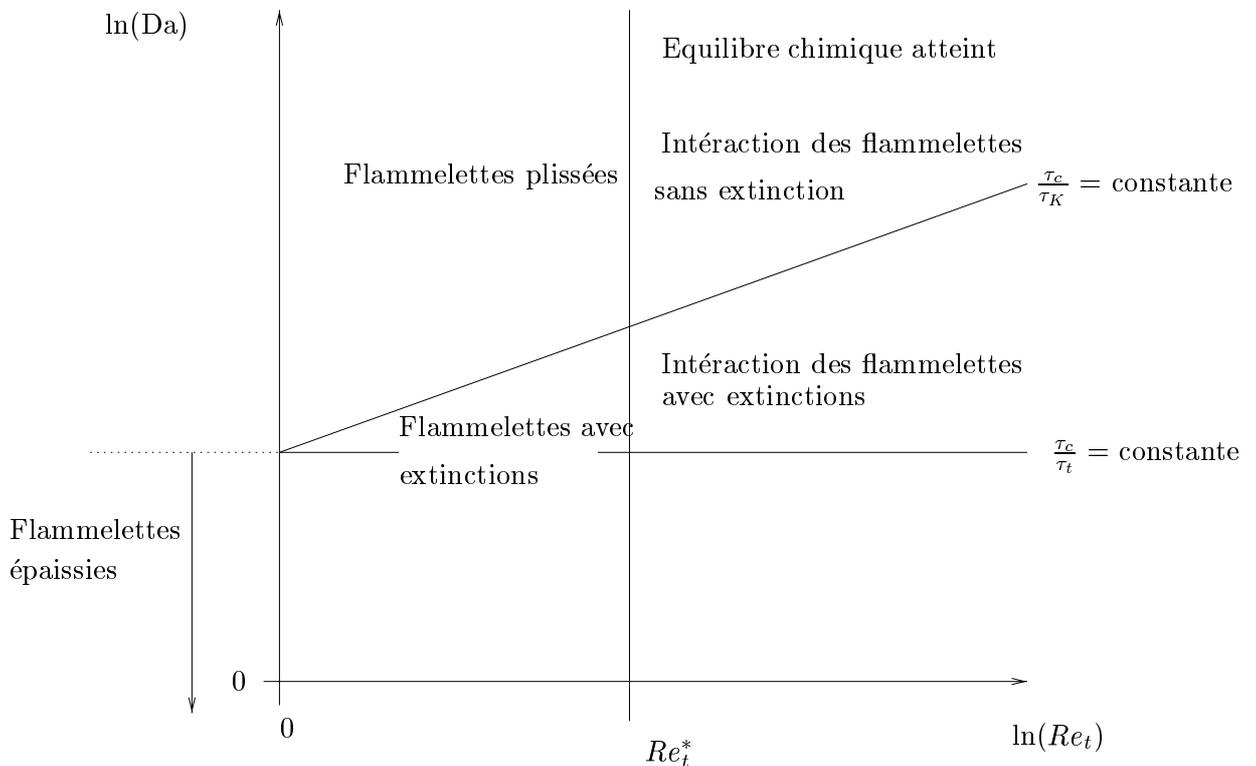


FIG. 5.4 – Diagramme des flammes de diffusion turbulentes dans le plan (Da, Re_t)

En évitant toute hypothèse a priori sur la structure fine de la flamme on peut calculer la PDF des champs scalaires de suffisamment de variables pour déterminer le taux de réaction.

Notre connaissance du milieu est alors améliorée non pas en fonction de l'espace, ce qui serait le cas si nous raffinions le maillage, mais en fonction de ou des variables qui nous intéressent, ce qui revient à discrétiser l'espace des phases. Cette connaissance s'avère suffisante pour calculer sans hypothèse supplémentaire les termes de production chimique moyens. Par exemple la connaissance de la Pdf $P(Y_F, Y_O, T)$ nous permet d'écrire de façon exacte :

$$\widetilde{\omega}_{c_f} = \int \int \int P(Y_F, Y_O, T) f(Y_F, Y_O, T) dY_F dY_O dT \quad (5.20)$$

Lundgren [70] est à l'origine de la méthode qui permet d'obtenir une équation pour la Pdf, de nombreux chercheurs l'utilisent maintenant et l'ont développée au cas de plusieurs variables [32]. L'équation pour une seule variable s'obtient facilement, ici pour c :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \langle \rho | c = c^* \rangle P(c^*, \vec{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho u_\alpha | c = c^* \rangle P(c^*, \vec{x}, t)}{\partial x_\alpha} \\ = & - \frac{\partial}{\partial c^*} \left(\langle \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_\alpha} \right) | c = c^* \rangle P(c^*, \vec{x}, t) \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial c^*} (\langle \omega_c | c = c^* \rangle P(c^*, \vec{x}, t)). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Il y a deux termes à modéliser dans cette équation: celui du membre de gauche contient la diffusion turbulente, et le premier de droite est le terme dit de mélange à petite échelle qui rapproche la PDF d'une fonction de Dirac. Ce terme dépend de la façon dont le mélange à petite échelle s'effectue mais aussi de l'intensité du mélange. Beaucoup de modèles ont été proposés qui traitent principalement de la manière: IEM(LMSE) [106] [81], CURL, GIEM, Mapping Closure... Tous ces modèles utilisent un temps de mélange qui décrit l'intensité de celui-ci et qui est l'équivalent de τ_{EBU} . Une autre façon de modéliser ce terme est de rajouter comme variable à la PDF le gradient des scalaires [38] et de réécrire le terme de micro mélange en fonction de la moyenne du gradient du scalaire [32]:

$$\frac{\partial}{\partial c^*} \left(\langle \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_\alpha} \right) | c = c^* \rangle P \right) = -D \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} \right) + \frac{\partial^2}{\partial c^2} \left(\langle \overline{\rho D \frac{\partial c}{\partial x_\alpha} \frac{\partial c}{\partial x_\alpha}} | c = c^* \rangle P \right).$$

Cependant les termes nouveaux dans l'équation de la PDF dus aux transports du gradient du scalaire nécessitent à leur tour d'être modélisés. La présence de flammelettes dans la flamme, avec des gradients très forts contrôlés par les phénomènes chimiques, doit en principe se traduire par des formes spéciales des modèles de micromélange. C'est ce qu'ont étudié Pope et al [90], et Galzin [41].

L'avantage de l'équation pour la PDF concerne le taux de réaction chimique (le dernier terme dans l'équation (5.21)) qui ne nécessite pas de fermeture particulière quand celui-ci est fonction des variables de la PDF. Par exemple ici si $\omega_c = \omega_c(c)$ alors la moyenne conditionnelle du taux de réaction devient exactement:

$$\langle \omega_c(c) | c = c^* \rangle = \omega_c(c^*). \quad (5.22)$$

Malheureusement les schémas cinétiques comprennent généralement des taux de réaction qui dépendent de plusieurs variables, or l'intégration de l'équation de transport de la PDF se fait sur autant de dimensions que la Pdf a de variables. Ce qui devient vite impossible avec des méthodes du type différences finies. Pope [89] a adapté la méthode de Monte-Carlo

au cas de l'intégration de l'équation de transport de la PDF rendant possible l'utilisation de cette équation. En effet, cette méthode fonctionne grâce à un système de particules tirées au hasard afin de simuler le caractère aléatoire de l'écoulement. La précision de la méthode évolue comme la racine carrée du nombre de particules mais le nombre de dimensions n'intervient que linéairement sur le nombre de particules à utiliser. Dans la pratique, cette méthode reste cependant assez lourde à utiliser dans le cas où le nombre de variables est grand car la place mémoire utilisée est de l'ordre du nombre de particules multiplié par le nombre de variables. Cependant Galzin [41] a montré la faisabilité de cette méthode pour un cas de calcul de type chambre de combustion de moteur. L'amélioration des performances des ordinateurs laisse supposer que c'est une méthode d'avenir. Notamment l'incorporation de nouveaux schémas cinétiques réduits se fait de façon directe alors qu'il faut recalculer complètement la bibliothèque de flammelettes pour les modèles à densité de surface de flamme. Une autre façon d'utiliser l'approche de type densité de probabilité est de présumer une forme approchée de telle manière que celle-ci ne dépende plus que de quelques paramètres, généralement limités au nombre de trois [13]. Ces trois paramètres sont alors obtenus en connaissant la valeur moyenne et la variance de la variable considérée. L'équation pour la variance du scalaire doit à son tour être modélisée, notamment elle contient un terme de dissipation des fluctuations du scalaire χ :

$$\chi = 2\rho D \overline{\frac{\partial c}{\partial x_\alpha} \frac{\partial c}{\partial x_\alpha}} \quad (5.23)$$

qui peut être exprimé grâce au modèle de micromélange déjà cité et qui fait aussi intervenir un temps de mélange équivalent à τ_{EBU} .

Quelques méthodes ont été proposées pour le calcul du temps de mélange ou de la dissipation scalaire χ . Ce temps de mélange du scalaire est souvent très important puisque le taux de production γ est inversement proportionnel pour une chimie infiniment rapide. De plus lorsque le taux de réaction chimique est fini, ce temps sert aussi à calculer les possibilités d'extinction. Il est très généralement pris proportionnel à l'échelle intégrale temporelle de la turbulence. Cependant la constante de proportionnalité varie souvent du simple au double suivant les cas et au cours du temps en fonction notamment de l'échelle spatiale caractéristique du scalaire [78],[36]. Les méthodes de flammelettes utilisent le modèle INTFS [74] basé sur des résultats de simulations numériques directes pour mieux prendre en compte ce temps. Le transport de la variable gradient du scalaire permet dans les méthodes de PDF une analyse plus fine du rôle du mélange. Mantel et al [72] ont dérivé et modélisé directement une équation pour la dissipation scalaire χ . Said et al [92] ont proposé un modèle qui corrige le temps de mélange quand le scalaire est réactif, simplement avec une formule algébrique.

Ces modèles donnent des résultats réalistes mais leur domaine de validité n'est pas bien connu. Comme dans le cas de la combustion laminaire la transposition des résultats obtenus en milieu purement gazeux aux milieux diphasiques n'est pas directe, c'est justement l'objet de ce travail.

5.2.3 Combustion turbulente en milieu diphasique

Une possibilité pour traiter la combustion dans les sprays aurait été de considérer la combustion globale du spray comme étant la somme de la combustion de chaque goutte individuellement. Il est alors possible de résoudre analytiquement les équations décrivant la combustion d'une goutte isolée [64]. Cependant des études expérimentales [76] ont eu tendance à montrer que la combustion d'une goutte seule était fortement perturbée par la présence

d'autres gouttes dans son voisinage. De plus l'analyse de la combustion diphasique a montré que le régime de combustion où chaque goutte est entourée d'une flamme n'est pas du tout général. C'est pourquoi les tentatives de modélisation de la combustion diphasique turbulente ne se basent pas sur la combustion d'une goutte isolée.

La plupart des tentatives tiennent compte de la présence des gouttes à travers des termes sources supplémentaires dus à la vaporisation. Par contre en ce qui concerne la combustion elles se servent des méthodes développées dans le cadre de la combustion purement gazeuse et la présence des gouttes n'est prise en compte que lors de la fermeture des termes nécessaires à ces méthodes. Nous retrouverons donc le même genre de modèle.

1. L'approche la plus simple consiste à supposer que la combustion turbulente n'est pas affectée du tout par la présence physique des gouttes mais seulement par les vapeurs que celles-ci produisent. Ce devrait être le cas quand le rayon des gouttes tend vers zéro, mais il existe aussi des cas où la présence des gouttes modifie fortement les flammes comme le montre les résultats expérimentaux de [3.2.4]. Le modèle le plus simple est celui de Magnussen, voir (5.15). Ce modèle par sa simplicité ne permet pas une prise en compte des gouttes. Cependant il a la possibilité de traiter à la fois des flammes de diffusion qui sont majoritaires dans un moteur Diesel, mais aussi grâce à la fraction massique des produits de combustion, des flammes de prémélange. Ce modèle a été employé pour simuler la combustion dans un moteur Diesel [112] associé avec le modèle chimique Shell [54]. Durant l'auto-allumage la chimie est supposée très lente devant le mélange ($Da \ll 1$), le taux de combustion est donc contrôlé par la chimie, le modèle Shell est utilisé. Quand la concentration en radicaux augmente la chimie est supposée s'accélérer jusqu'à devenir beaucoup plus rapide que le mélange ($Da \gg 1$), le modèle de Magnussen est alors utilisé, à partir d'un certain seuil plutôt arbitraire. La période de transition est critique car les deux modèles ne sont plus dans un cadre respectant leurs hypothèses. Pires da Cruze et *al* suggèrent [87] qu'il pourrait être plus intéressant de bien calculer cette période transitoire en utilisant un modèle de combustion qui prend en compte des effets de chimie non infiniment rapide même si le modèle chimique est moins complet que le modèle Shell.
2. Des modèles pour la combustion diphasique turbulente ont été proposés, basés sur le calcul de la densité de surface de flamme. Ces modèles se décomposent en deux catégories différentes. Premièrement en supposant que la structure des flammelettes est similaire à la structure de flamme gazeuse il faut préciser s'il s'agit de flammelettes de diffusion ou de flammelettes de prémélange. Or les deux types de flammelettes peuvent exister dans la structures fines des flammes diphasiques. Il faut alors connaître la densité de surface de flamme de prémélange et la densité de surface de flamme de diffusion [31] [105]. Il est aussi possible de traiter les flammes de type prémélangé sans utiliser le modèle de surface de flamme et d'utiliser le modèle de flamme cohérente pour la flamme turbulente de diffusion qui dans le cas du moteur Diesel représente la plus grande partie de la combustion. Par exemple Musculus [80] propose un modèle appliqué au cas du moteur Diesel où il distingue trois phases:
 - une phase de chimie à basse température où le modèle Shell est utilisé,
 - puis une étape de combustion prémélangée à haute température où une loi d'Arrhenius est utilisée,

- pour finir le modèle de flamme cohérente est utilisé pour la flamme de diffusion turbulente restante.

Barbeau [6] utilise aussi le modèle de surface de flamme, mais considère une flammelette de prémélange où le taux de réaction par unité de surface de flamme est calculé comme la moyenne de ce taux de réaction pour différentes flammelettes de prémélange avec différentes richesses correspondant chacune à une variable de mélange Z . Il utilise alors une PDF présumée de cette variable de mélange, ce qui permet de décrire les fluctuations de richesse. Dans cette approche, il reste que le calcul de Σ lui même doit être très dépendant de la présence des gouttes, et ceci n'a pas été pris en compte.

La deuxième approche consiste à déterminer le taux de réaction d'une flamme laminaire diphasique. Dans ce cas les flammelettes ne se situent pas entre les gouttes mais plutôt autour de paquets de gouttes, et comprennent les gouttes dans leur propre structure. De nombreuses expériences et simulations numériques directes ont été dédiées aux flammes laminares à contre courant diphasique [62], [62], [52], [20] qui permettent, dans un premier temps, d'étudier les flammes laminares diphasiques et qui pourraient servir de bibliothèque pour un modèle de flammelettes dans un deuxième temps. Deux modèles ont été présentés qui utilisent ce principe tout d'abord en utilisant une bibliothèque de flammes laminares qui ne tient pas compte de la présence des gouttes [45] [68], ce qui correspond approximativement au cas de flammelettes à prévaporisation. Une amélioration a été faite en utilisant des flammelettes diphasiques [57], mais alors le problème est que la variable Z ne varie plus de façon monotone dans la traversée de la flamme diphasique et ne permet plus directement de calculer le taux de réaction moyen sans hypothèse supplémentaire. Les flammelettes laminares utilisées dans la bibliothèque sont des flammes de diffusion ce qui limite l'utilisation de ces modèles aux flammes turbulentes de diffusion à chimie suffisamment rapide pour négliger les flammelettes de prémélange qui pourraient exister.

3. Il est possible de calculer la PDF de plusieurs scalaires de la même façon que dans le cas gazeux mais en tenant compte du spray [34]. Dans ce cas il n'est pas nécessaire de préjuger que la flamme est composée de flammelettes laminares. Donc il est possible de traiter à la fois des flammes de prémélange et des flammes de diffusion, sans présumer la structure du front de flamme. Cependant il faut transporter autant d'espèces qu'il est nécessaire pour calculer le taux de réaction, ce qui pour un milieu adiabatique correspond au minimum à deux variables. Même avec une méthode de type Monte-Carlo, la résolution de l'équation de transport de la PDF des scalaires en plus de la résolution de l'équation de transport du spray, aussi avec une méthode de Monte-Carlo, reste une solution onéreuse en terme de puissance de calcul,[35]. Afin de résoudre des cas pratiques telle que la combustion dans un moteur Diesel, il paraît utile d'essayer de présumer la PDF. Or si cette méthode a déjà fait ses preuves dans le cas purement gazeux avec le transport d'un seul scalaire, son extension à deux scalaires par exemple Z et Y_{O_2} pose beaucoup de problèmes. Dans le cadre similaire de la combustion prémélangée diphasique, Zurbach a proposé de présumer la PDF de Y_f et Y_{O_2} grâce à une fonction bêta à deux dimensions. Cependant cette forme impose une relation entre ces deux variables qui ne repose pas sur des considérations physiques. Il est aussi possible de supposer l'indépendance statistique des deux variables [87]. Mais cette hypothèse paraît un peu forte, on s'attend en effet à ce que le fluide qui a une richesse proche de la

stœchiométrie, brûle plus vite, et donc que sa concentration en oxygène soit plus faible. Tout au contraire Borghi et *al* ont proposé dans le modèle MIL [11] une relation entre la fraction massique d'oxygène et la richesse Z basée sur l'hypothèse de réaction chimique infiniment brusque. Ce modèle permet, en ne calculant que la PDF de Z , d'en déduire celle de Y_{O_2} . Tout en prenant en compte la plupart des effets de cinétique chimique, il reste utilisable dans des calculs complexes.

4. Dans cette étude nous chercherons dans un premier temps à calculer la PDF de Z de façon présumée en faisant particulièrement attention aux modifications nécessaires pour tenir compte du spray. Cette modélisation sera utile tant pour les modèles de PDF que pour les modèles de flammelettes qui prennent en compte les fluctuations de richesse grâce au calcul de la PDF de Z . D'autre part nous adapterons aussi le modèle MIL au cas diphasique afin de pouvoir prendre en compte des effets de chimie non infiniment rapide. La modélisation complète doit permettre de réussir un calcul de combustion dans une configuration de type moteur Diesel.

5.3 Estimation de la PDF de Z

5.3.1 Equation de transport pour la PDF de Z

Il est utile pour différents types de modèles de calculer la fonction de densité de probabilité de la variable de mélange Z . Pour estimer cette fonction il est possible d'écrire une équation de transport en suivant la méthode développée par Ludgren [70]. La variable transportée est $\rho P(Z)$. Il y a plusieurs définitions possibles pour ce produit. Nous avons choisi de prendre ρ comme la masse volumique des gaz et de prendre $P(Z)$ comme la densité de probabilité d'avoir des particules gazeuses ayant pour valeur Z parmi toutes les particules gazeuses. Les résultats de [4.1.2] nous ont fourni les équations permettant de décrire de façon locale et instantanée le milieu, ils servent de base au développement ci-après. Il faut d'abord utiliser une équation locale et instantanée pour la masse volumique des gaz puisque l'on transporte des quantités massiques:

- Equation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = \rho \omega_v$$

- et pour variable de mélange Z :

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) + \rho \omega_v.$$

Nous développons l'équation de Z pour faire apparaître le terme source d'évaporation dû au transport de la masse volumique.

$$\underbrace{Z \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right)}_{Z \rho \omega_v} + \rho \left(\frac{\partial Z}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) + \rho \omega_v,$$

d'où

$$\rho \frac{DZ}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) + (1 - Z) \rho \omega_v$$

où $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ est la dérivé particulaire en suivant la masse totale de gaz.

On utilise $\mathcal{P}(\hat{Z}; x, t) = \delta(\hat{Z} - Z(x, t))$, la "fine grained PDF" de Z . La moyenne de cette quantité correspond exactement à la fonction de densité de probabilité de Z . Le transport de cette "fine grained PDF" peut se réécrire en faisant apparaître des termes de transport dans l'espace de phase et l'équation de transport dans l'espace physique de Z :

$$\begin{aligned} \rho \frac{D\mathcal{P}}{Dt} &= \rho \left(\frac{\partial \delta(\hat{Z} - Z)}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial \delta(\hat{Z} - Z)}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) \\ &= -\rho \frac{DZ}{Dt} \frac{\partial \delta(\hat{Z} - Z)}{\partial \hat{Z}} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\delta(\hat{Z} - Z) \rho \frac{DZ}{Dt} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) \mathcal{P} + (1 - Z) \rho \omega_v \mathcal{P} \right) \end{aligned}$$

avec :

$$\rho \frac{D\mathcal{P}}{Dt} = -\rho \omega_v \mathcal{P} + \frac{\partial \rho \mathcal{P}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha \mathcal{P}}{\partial x_\alpha}.$$

Finalement on obtient une équation qui fait apparaître des termes dus à l'évaporation du liquide:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \mathcal{P}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha \mathcal{P}}{\partial x_\alpha} &= -\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) \mathcal{P} \right) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left((1 - Z) \rho \omega_v \mathcal{P} \right) \\ &\quad + \rho \omega_v \mathcal{P}. \end{aligned}$$

L'équation pour le transport pour la PDF s'obtient en effectuant la moyenne statistique de cette équation, il vient:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \rho | Z = \hat{Z} \rangle P}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho u_\alpha | Z = \hat{Z} \rangle P}{\partial x_\alpha} &= -\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\langle \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) | Z = \hat{Z} \rangle P \right) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\langle (1 - \hat{Z}) \rho \omega_v | Z = \hat{Z} \rangle P \right) \\ &\quad + \langle \rho \omega_v | Z = \hat{Z} \rangle P \end{aligned}$$

La partie de gauche de cette équation contient un terme d'accumulation et un terme de convection par la vitesse des gaz. Ces deux termes contiennent des moyennes conditionnées par la valeur de \hat{Z} . Si la quantité moyennée n'est fonction que de Z alors la moyenne conditionnée en \hat{Z} correspond à la valeur de cette fonction pour $Z = \hat{Z}$, par exemple:

$$\text{Si } \rho = \rho(Z) \text{ alors } \langle \rho | Z = \hat{Z} \rangle = \rho(\hat{Z}). \quad (5.24)$$

Si la fonction dépend d'autres variables φ_i indépendantes de Z alors la moyenne conditionnelle n'est pas fermée. La solution la plus simple est alors de remplacer la moyenne conditionnelle par une moyenne non conditionnelle, ce qui suppose l'indépendance statistique entre la fonction moyennée et la variable de conditionnement, par exemple:

$$\text{Si } \rho = \rho(\varphi_i) \text{ alors on suppose } \langle \rho | Z = \hat{Z} \rangle = \bar{\rho}. \quad (5.25)$$

Le terme suivant peut se réécrire en faisant apparaître la dissipation du scalaire Z moyenne conditionnée par $Z = \hat{Z}$. Ce terme est non fermé et il n'y a pas de relation directe entre la valeur de la dissipation de Z et Z lui-même. Même si on suppose que la dissipation de Z et Z sont statistiquement indépendants, la dissipation moyenne conditionnée devient une dissipation moyenne simple:

$$\langle \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} | Z = \hat{Z} \rangle = \overline{\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha}}. \quad (5.26)$$

Cette hypothèse d'indépendance n'est pas justifiée mais elle montre qu'il faudrait au minimum connaître la dissipation moyenne. Girimaji a montré [47] que la dissipation moyenne conditionnée devait être nulle pour les extremums du scalaire Z , et non nulle ailleurs, ceci montre que la dissipation n'est pas indépendante du scalaire. Il y a donc deux problèmes: l'un est de calculer la dissipation moyenne [72] et l'autre est de répartir cette dissipation moyenne en fonction de Z [21][61][43].

Les derniers termes sont nouveaux, ils sont dus à la vaporisation du spray. Le premier de ces deux termes provient du taux de vaporisation dans l'équation pour Z . Puisque le taux de vaporisation est proportionnel à une fonction de Dirac caractérisant la surface du liquide, cette contribution n'a lieu que pour des valeurs de Z pouvant exister à la surface du liquide. Il augmente la valeur de $P(Z)$ pour ces valeurs de Z . Le deuxième terme provient de l'augmentation de la masse volumique des gaz. Dans le produit $\rho P(Z)$ c'est la masse volumique qui augmente, la somme de $P(Z)$ reste égale à un. Il agit aussi en modifiant la forme de $P(Z)$ pour des valeurs de Z correspondant à la surface. Le maintien de valeurs élevées de $P(Z)$ pour les valeurs de Z correspondant à la surface est illustré dans [34][35] où Durand et al ont calculé l'évolution de $P(Z)$ grâce à une méthode de Monte Carlo. Afin d'éviter de résoudre directement cette équation, ce qui reste une opération lourde en moyen de calcul, nous allons chercher comment "présumer" la forme de cette PDF.

5.3.2 Méthode approchée pour calculer la PDF de Z

Nous avons représenté sur la Figure: 5.5 une forme de la PDF Z qui devrait raisonnablement exister dans un milieu diphasique.

Dans le cas purement gazeux la PDF de Z varie pour $Z = 0$ correspondant à de l'oxydant pur à $Z = 1$ ce qui correspond à du combustible gazeux pur elle peut avoir un pic en $Z = 0$ et un pic en $Z = 1$. La forme de la PDF peut être approchée en fonction de seulement trois paramètres. Il suffit de trois équations pour les déterminer:

$$1 = \int_0^1 P(Z) dZ \quad (5.27)$$

$$\tilde{Z} = \int_0^1 Z P(Z) dZ \quad (5.28)$$

$$\widetilde{Z'^2} = \int_0^1 (Z - \tilde{Z})^2 P(Z) dZ \quad (5.29)$$

\tilde{Z} et $\widetilde{Z'^2}$ doivent être obtenus à partir de leurs équations de transport modélisées, et cela permet de calculer la forme approchée de $P(Z)$.

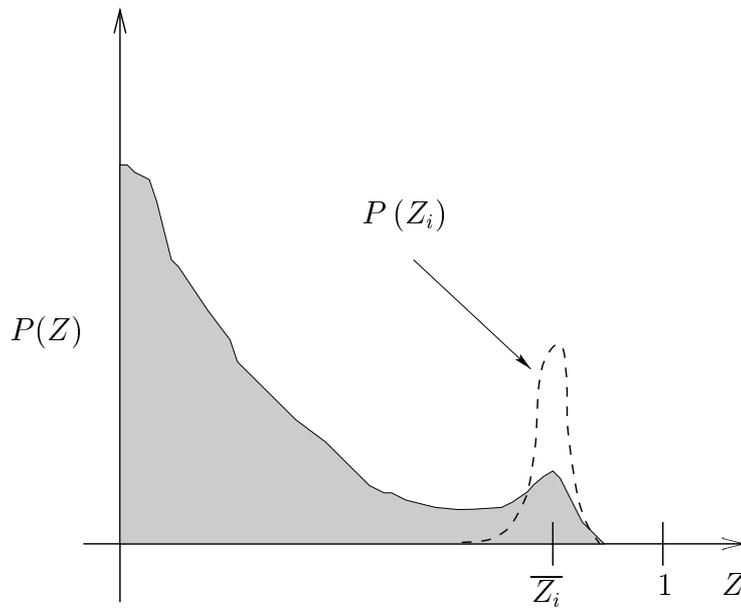


FIG. 5.5 – Forme attendue de $P(Z)$ pour un milieu contenant des gouttellettes de fuel qui s'évaporent

Dans le cas d'un spray qui s'évapore le combustible gazeux qui entre dans le domaine étudié n'est pas pur ($Z = 1$). En effet la vapeur de combustible provient de la surface des gouttes, qui par suite de l'équilibre liquide vapeur traduit par la formule de Clapeyron, n'est pas composée de vapeur de combustible pur, sauf si le liquide bout. En général dans les moteurs Diesel le fuel utilisé est assez lourd et la température du liquide ne permet pas l'ébullition. Ainsi la fraction massique de vapeur de fuel à la surface des gouttes est inférieure à l'unité et donc la valeur initiale de Z des particules évaporées est $Z_i < 1$. Les gouttes n'ont pas en général la même température, car elles n'ont pas le même rayon ni la même histoire. Il faut donc tenir compte d'une nouvelle variable fluctuante Z_i qui aura aussi une PDF de Z_i . C'est un paramètre supplémentaire qui doit être utilisé pour presumer la PDF de Z . On a schématisé sur la Figure: 5.5 la PDF de Z_i . Celle de $P(Z)$ s'en déduit en tenant compte ensuite du mélange des particules fluides évaporées avec l'air pur, donc du côté $Z = 0$.

Une fois l'allure de la PDF connue il faut trouver une forme approchée de la PDF de Z qui ait les principales caractéristiques de la PDF réelle. Plusieurs formes ont été utilisées pour approcher la PDF d'un scalaire, notamment une forme composée de pics et de rectangles [13], [77]. La forme approchée la plus utilisée est celle décrite par une fonction β qui dépend de \tilde{Z} et \tilde{Z}'^2 . Cependant ces formes approchées ont été choisies parce que d'un point de vue géométrique elles correspondaient aux formes de PDF mesurées ou calculées par simulation numérique directe [36]. Comme ces formes ne sont pas basées sur des considérations physiques, la prise en compte du nouveau paramètre lié au variable Z_i n'est pas directe. Nous verrons plus loin comment des formes de PDF réalistes peuvent s'approcher dans des configurations physiques simples même en tenant compte de cette $P(Z_i)$.

5.3.3 Z_i , la limite supérieure de domaine de Z

Si la température des gouttes dans le spray est inférieure à la température d'ébullition il n'existe pas de vapeur de fuel à l'état pur. En effet les plus grandes concentrations de combustible gazeux se rencontrent près de la surface du liquide pour les particules fluides qui viennent juste de s'évaporer. Or cette concentration est limitée par la valeur de la pression de vapeur saturante calculée près de la surface. Comme les gouttes sont entourées d'une atmosphère oxydante la fraction massique de fuel va diffuser dans l'air et donc baisser quand on s'éloigne de la surface. Ainsi le maximum pour Z , qui est relié à la présence de vapeur de combustible, se situe aussi à la surface du liquide, cette propriété influence la forme de la PDF de Z pour la partie supérieure du domaine de Z . Nous noterons Z_i la valeur de Z pour une particule qui vient juste de s'évaporer. A l'instant initial $Z_i = Z_S$ à l'endroit de la surface où vient de se produire l'évaporation. Cependant Z_i et Z_S sont des quantités différentes: Z_S n'existe qu'à la surface du liquide alors que Z_i existe partout où il y a des particules fluides qui ont contenu de la vapeur de fuel, même si tout le liquide s'est évaporé. C'est une valeur transportée par la particule fluide comme une caractéristique de la surface dont elle est initialement sortie. Comme l'indique la Figure: 5.5 on s'attend à ce que la partie de $P(Z)$ pour les valeurs supérieures de Z dépende fortement de la PDF des valeurs de Z_i .

La PDF de Z_i est définie par le produit $P_i(Z_i) dZ_i$ qui est la probabilité parmi la quantité de vapeur, quelque soit sa forme, d'avoir de la vapeur qui se soit évaporée dans une particule fluide ayant à l'instant de l'évaporation une valeur de Z comprise entre Z_i et $Z_i + dZ_i$. La quantité de vapeur quelque soit sa forme est donnée par unité de volume par: ρZ . Ainsi si on peut considérer le rapport:

$$\frac{\text{La masse de vapeur moyenne évaporée avec } Z_i \in [Z_i, Z_i + dZ_i]}{\text{Volume total}} = \bar{\rho} \tilde{Z} P_i(Z_i) dZ_i. \quad (5.30)$$

Puisque cette quantité est simplement une masse de vapeur par unité de volume elle doit suivre exactement le même type d'équation que la quantité de vapeur totale par unité de volume: $\bar{\rho} \tilde{Z}$. Cependant le terme de vaporisation est conditionné par le fait que $Z_S = Z_i$. Ceci permet d'obtenir l'équation de transport:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z} P_i(Z_i) dZ_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_\alpha \tilde{Z} P_i(Z_i) dZ_i}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Z} P_i(Z_i) dZ_i}{\partial x_\alpha} \right) + \bar{\rho} \tilde{\omega}_{v|Z_i} dZ_i. \quad (5.31)$$

Cette équation est fermée puisque le terme de vaporisation conditionné est simplement la somme de tous les flux de vaporisation des gouttes dont $Z_S \in [Z_i, Z_i + dZ_i]$:

$$\bar{\rho} \tilde{\omega}_{v|Z_i} = \sum_k^{k=1,n} \left(Z_S^{(k)} \dot{m}^{(k)}, \text{ si } Z_i < Z_S^{(k)} < Z_i + dZ_i \right). \quad (5.32)$$

On pourrait à partir de (5.31) obtenir directement une équation pour $P_i(Z_i)$. Afin de ne pas alourdir les calculs nous n'utiliserons pas une résolution complète de cette équation de PDF. Comme de plus on s'attend à ce que le domaine de variation des fluctuations de Z_i soit plus étroit que le domaine de Z , nous nous contenterons de représenter les effets de $P(Z_i)$ à travers sa valeur moyenne: \bar{Z}_i . L'équation (5.31) permet d'obtenir directement par intégration sur tout le domaine possible de Z_i une équation de transport pour \bar{Z}_i , puisque:

$$\bar{Z}_i = \int Z_i P_i(Z_i) dZ_i. \quad (5.33)$$

Finalement, il vient:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Z} \overline{Z}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u}_\alpha \widetilde{Z} \overline{Z}_i}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{Z} \overline{Z}_i}{\partial x_\alpha} \right) + \bar{p} \int_0^1 Z_i \widetilde{\omega}_v |_{Z_i} dZ_i. \quad (5.34)$$

Le dernier terme ne pose pas de difficulté puisque le taux de vaporisation contient la fonction de Dirac caractéristique de la surface :

$$\int_0^1 Z_i \widetilde{\omega}_v |_{Z_i} dZ_i = \widetilde{Z}_s \widetilde{\omega}_v = \widetilde{Z} \widetilde{\omega}_v. \quad (5.35)$$

Ce terme est exactement le même terme que celui que l'on va trouver dans l'équation pour \widetilde{Z}^2 .

5.3.4 Equation de transport pour \widetilde{Z}^2

Il existe deux façons possibles d'obtenir une équation de transport de \widetilde{Z}^2 . La première consiste à utiliser l'équation exacte de Z , par exemple:

- D'une part l'équation de Z est multipliée par $2Z$ ce qui permet d'obtenir une équation pour Z^2 . La moyenne de cette équation donne une équation pour \widetilde{Z}^2 .
- D'autre part la moyenne de l'équation pour Z donne une équation pour \widetilde{Z} . Elle est ensuite multipliée par $2\widetilde{Z}$ ce qui donne une équation pour \widetilde{Z}^2 .
- Finalement l'équation pour \widetilde{Z}^2 moins l'équation pour \widetilde{Z}^2 donne l'équation de transport pour \widetilde{Z}^2 .

Le calcul suivant cette méthode est développé dans l'annexe [5.5.1]. La deuxième façon d'obtenir cette équation utilise l'équation de transport de $P(\hat{Z})$:

- D'une part l'équation de transport de $P(\hat{Z})$ est multipliée par \hat{Z}^2 ce qui donne une équation pour $\hat{Z}^2 P(\hat{Z})$. L'intégration de cette équation sur tout le domaine possible de \hat{Z} donne une équation pour \widetilde{Z}^2 .
- D'autre part l'équation de transport de la $P(\hat{Z})$ est multipliée par \hat{Z} ce qui donne une équation pour $\hat{Z} P(\hat{Z})$. L'intégration de cette équation sur tout le domaine possible de \hat{Z} donne l'équation pour \widetilde{Z} , qui multipliée par \widetilde{Z} donne une équation pour \widetilde{Z}^2 .
- Finalement la différence des deux équations donne comme précédemment l'équation pour \widetilde{Z}^2 , voir l'annexe [5.5.2].

Ces deux méthodes nécessitent l'écriture préalable de l'équation exacte pour Z dans le cas d'un spray qui s'évapore, ce qui est fait au [4.1.4]. Les deux méthodes mènent à la même équation qui contient des termes qui existent dans un milieu gazeux et des termes supplémentaires liés à la vaporisation:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_g \widetilde{Z}^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}_g \widetilde{u}_\alpha \widetilde{Z}^2}{\partial x_\alpha} &= - \frac{\partial \bar{\rho}_g u'_\alpha \widetilde{Z}^2}{\partial x_\alpha} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\rho}_g D \frac{\partial \widetilde{Z}^2}{\partial x_\alpha} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -2\overline{\rho}g\widetilde{u}'_{\alpha}\widetilde{Z}'\frac{\partial\widetilde{Z}}{\partial x_{\alpha}} \\
& -2\overline{\rho}gD\frac{\partial\widetilde{Z}'\partial\widetilde{Z}'}{\partial x_{\alpha}\partial x_{\alpha}} \\
& +2\left(\widetilde{Z}\widetilde{\omega}'_v - \widetilde{Z}'\widetilde{\omega}'_v\right) \\
& +\widetilde{Z}^2\widetilde{\omega}'_v - \widetilde{Z}'^2\widetilde{\omega}'_v
\end{aligned}$$

Cette équation contient des termes de corrélation inconnus provenant de l'opération de moyenne qu'il faut fermer. Nous utiliserons les fermetures utilisées dans le cas purement gazeux pour les termes qui ne sont pas directement liés au spray. Le terme de transport par les fluctuations de vitesse est fermé en utilisant l'hypothèse de flux de diffusion turbulent.

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial\overline{\rho}u'\widetilde{Z}'}{\partial x_{\alpha}} &= \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}\left(\rho D_t\frac{\partial Z}{\partial x_{\alpha}}\right) \\
-\frac{\partial\overline{\rho}u'\widetilde{Z}'^2}{\partial x_{\alpha}} &= \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}\left(\overline{\rho}D_t\frac{\partial\widetilde{Z}'^2}{\partial x_{\alpha}}\right) \\
-2\overline{\rho}u'\widetilde{Z}'\frac{\partial\widetilde{Z}}{\partial x_{\alpha}} &= 2\overline{\rho}D_t\frac{\partial\widetilde{Z}}{\partial x_{\alpha}}\frac{\partial\widetilde{Z}}{\partial x_{\alpha}}
\end{aligned}$$

Le terme de dissipation des fluctuations χ est fermé de la même façon que dans le cas gazeux, en le reliant au temps turbulent:

$$\chi = D\frac{\partial\widetilde{Z}'\partial\widetilde{Z}'}{\partial x_{\alpha}\partial x_{\alpha}} = C\frac{\widetilde{Z}'^2}{\tau_t} = C\frac{\varepsilon}{k}\widetilde{Z}'^2. \quad (5.36)$$

Cette fermeture n'est probablement pas suffisante et nécessite de futurs travaux. En effet même dans le cas purement gazeux la constante C varie beaucoup suivant les cas. Pour corriger cela Mantel et *al* ont dérivé et fermé une équation de transport pour χ . Un travail similaire dans le cas diphasique devrait faire apparaître des termes supplémentaires qui permettrait de prendre en compte les effets du spray. Une partie de l'influence des gouttes sur ces termes est prise en compte par l'intermédiaire de leur action sur la turbulence et de τ_t . On peut réécrire χ en utilisant les longueurs de Taylors liées à la turbulence λ_t et celles liées aux fluctuations du scalaire λ_Z :

$$\chi = D\frac{\partial\widetilde{Z}'\partial\widetilde{Z}'}{\partial x_{\alpha}\partial x_{\alpha}} = D\frac{\widetilde{Z}'^2}{\lambda_Z^2} = \frac{\nu}{\mathcal{P}r}q_{\lambda}^2\frac{\widetilde{Z}'^2}{\lambda_t^2}, \quad (5.37)$$

où $\mathcal{P}r$ est le nombre de Prandtl et $q_{\lambda} = \frac{\lambda_t}{\lambda_Z}$. Or par définition:

$$\varepsilon = \nu\frac{\partial\widetilde{u}'_i}{\partial x_i}\frac{\partial\widetilde{u}'_i}{\partial x_i} = \nu\frac{k}{\lambda_t^2}. \quad (5.38)$$

Donc en remplaçant on obtient finalement:

$$\chi = \frac{1}{\mathcal{P}r}q_{\lambda}^2\frac{\varepsilon}{k}\widetilde{Z}'^2. \quad (5.39)$$

Ce qui montre bien que la constante C du modèle dépend du rapport de la longueur caractéristique des fluctuations de vitesses turbulentes sur la longueur caractéristique des fluctuations de Z .

Quand les fluctuations de Z sont dues au spray il se pourrait que leur longueur caractéristique dépende du rayon des gouttes et de l'espace entre les gouttes. Alors que les fluctuations de vitesses turbulentes, si elles ne sont pas créées par le champ de gouttes, peuvent avoir une longueur caractéristique totalement indépendante de celle du champ de Z . Dès lors il n'y a plus de raison pour que le rapport q_λ soit constant. Cependant la façon de prendre en compte ce phénomène n'est pas encore claire et nécessite de futurs travaux, nous garderons donc ici le modèle le plus simple où C est une constante.

Les termes liés à l'évaporation font apparaître deux nouvelles corrélations $\widetilde{Z}\omega_v$ et $\widetilde{Z}^2\omega_v$. L'écriture des équations exactes en [4.1.4], nous a permis d'exprimer le taux de vaporisation comme produit d'un taux de vaporisation local par une fonction de Dirac caractéristique de la surface: $\omega_v = u_{vap} \delta_{calS}$. Borghi [14] a remarqué que si les particules fluides gazeuses à la surface du liquide sont caractérisées par une valeur Z_S constante, ce qui serait le cas si toutes les gouttes avaient la même taille et la même histoire, alors les corrélations précédentes grâce à la fonction de Dirac dans le terme d'évaporation se réécriraient exactement:

$$\begin{aligned} - \widetilde{Z}\omega_v &= Z_S \widetilde{\omega}_v, \\ - \widetilde{Z}^2\omega_v &= Z_S^2 \widetilde{\omega}_v. \end{aligned}$$

Dans le cas plus général où la valeur de Z_S n'est pas constante le long de la surface il est quand même possible de réécrire les corrélations précédentes en faisant appel à la valeur de Z uniquement à la surface:

$$\begin{aligned} - \widetilde{Z}\omega_v &= \widetilde{Z}_S \omega_v, \\ - \widetilde{Z}^2\omega_v &= \widetilde{Z}_S^2 \omega_v. \end{aligned}$$

Ici le tilde indiquant la moyenne se résume à la moyenne sur toutes les gouttes qui peuvent être au point donné. Comme on utilise une méthode de Monte Carlo pour représenter le spray il est tout à fait possible de connaître les fluctuations de Z à la surface du liquide en supposant que chaque goutte donnée à une valeur de Z_S donnée. Ainsi à l'aide des caractéristiques de la goutte représentée par la particule stochastique (k), nous pouvons calculer une valeur $Z_S^{(k)} = f(T^{(k)}, Y_f^{(k)}, \widetilde{Z}, \widetilde{T})$. L'ensemble des valeurs $Z_S^{(k)}$ décrit la PDF de Z à la surface du liquide, ce qui permet de réécrire les corrélations dues à la vaporisation sans difficultés supplémentaires:

$$\begin{aligned} - \overline{\rho} \widetilde{Z}\omega_v &= \sum_k^{k=1,n} \frac{Z_S^{(k)} \dot{m}^{(k)}}{\mathcal{V}}, \\ - \overline{\rho} \widetilde{Z}^2\omega_v &= \sum_k^{k=1,n} \frac{\left(Z_S^{(k)}\right)^2 \dot{m}^{(k)}}{\mathcal{V}}. \end{aligned}$$

Donc finalement ces nouveaux termes de vaporisation peuvent être calculés sans difficulté grâce à l'approche Lagrangienne statistique de la phase liquide.

L'équation complètement modélisée de \widetilde{Z}^{I2} doit vérifier certaines propriétés. Notamment le groupe d'équation pour $\overline{\rho}$, \widetilde{Z} , \widetilde{Z}^{I2} forme un système différentiel du type $\frac{d}{dt}(\underline{X}) = f(\underline{X})$, où \underline{X} est le vecteur $\overline{\rho}$, \widetilde{Z} , \widetilde{Z}^{I2} . Pour vérifier que la modélisation de ces équations (et en particulier celle de \widetilde{Z}^{I2}) est "réalisable", il faut que les trajectoires, dans l'espace des X_i , de l'évolution de ces variables d'après le système différentiel, restent dans une certaine zone où:

$$- \overline{\rho} > 0,$$

$$\begin{aligned}
 & - 0 < \tilde{Z} < 1, \\
 & - 0 < \widetilde{Z'^2} < \tilde{Z} (Z_i - \tilde{Z}).
 \end{aligned}$$

Ces contraintes n'apparaissent pas clairement dans les termes modélisés. Il est toutefois possible de juger les nouveaux termes qui sont liés à l'évaporation dans un cas limite où il n'y a pas de gradient de \tilde{Z} et où il n'y a pas non plus de dissipation χ , voir annexe [5.5.4]. Dans ce cas limite on vérifie que les termes semblables à ceux qui sont dus à la vaporisation dans l'équation de $\widetilde{Z'^2}$, permettent de retrouver exactement la limite supérieure de $\widetilde{Z'^2}$ sans la dépasser jamais, ce qui est parfaitement réaliste.

5.3.5 Forme approchée de la PDF

Nous disposons maintenant des valeurs de \tilde{Z} , $\widetilde{Z'^2}$ et \overline{Z}_i pour présumer la forme de la PDF. Il nous reste donc à trouver la fonction f telle que: $P(Z) = f(\tilde{Z}, \widetilde{Z'^2}, \overline{Z}_i)$. Puisque les formes utilisées dans les cas gazeux reposent principalement sur des comparaisons géométriques l'extension de leur validité dans le cas diphasique pose problème. Notamment il faut y inclure la nouvelle borne supérieure du domaine réalisable de Z : \overline{Z}_i . Afin de mieux comprendre comment inclure Z_i nous proposons d'utiliser une méthode plus physique. Il s'agit de chercher une configuration physique suffisamment simple pour que l'on puisse y calculer la PDF. L'approximation consistera alors à supposer que la forme de la PDF valide dans le cas simple est une bonne approximation de la PDF réelle dans le cas général. Nous avons choisi d'utiliser comme cas de référence le réacteur homogène non parfaitement prémélangé Figure: 5.6. Dans le cas

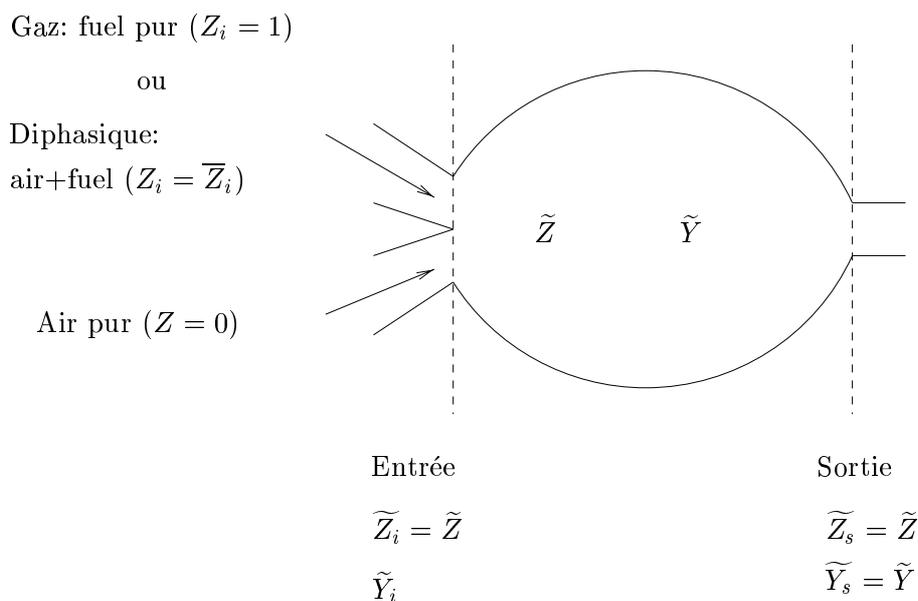


FIG. 5.6 – Schéma du réacteur homogène non parfaitement mélangé

gazeux le fuel et l'oxydant sont introduits séparément et ne se mélangent pas instantanément, il reste donc des inhomogénéités instantanées de richesse, Z fluctue. Par contre le réacteur est homogènement brassé pour que n'importe où les quantités moyennes statistiques soient

constantes et égales à la moyenne effectuée sur tout le réacteur. De plus pour être en régime stationnaire le réacteur comporte une sortie dont le débit s'équilibre avec l'entrée. La moyenne de toutes les variables effectuée à la sortie est aussi égale à la moyenne globale sur tout le réacteur. Dans le cas gazeux, par exemple, la valeur moyenne de Z est fixée par les débits respectifs de fuel et d'oxydant. Par contre la variance de Z et le taux de ségrégation diminuent avec le temps, au fur et à mesure que les fluctuations se dissipent. Ils dépendent donc, en plus des conditions d'entrée, du temps de séjour moyen des particules dans le réacteur. Pour prendre en compte les propriétés spéciales du milieu diphasique nous utiliserons comme condition d'entrée pour le fuel des valeurs correspondant au mélange gazeux qu'il y a à la surface des gouttes. C'est-à-dire qu'à la place d'avoir un écoulement d'entrée de fuel pur correspondant à $Z = 1$ nous aurons un prémélange correspondant à $Z = \bar{Z}_i$.

L'équation Lagrangienne qui décrit l'évolution instantanée de Z est:

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{d}{dx_\alpha} \left(D \frac{dZ}{dx_\alpha} \right) \quad (5.40)$$

Comme on ne connaît pas les gradients locaux de Z , il faut modéliser le terme de diffusion aux petites échelles qui correspondent au terme de micromélange dans l'équation de la PDF de Z . La deuxième étape de cette méthode pour calculer la PDF de Z consiste dans le choix de ce modèle. Le modèle le plus simple est le modèle IEM [106], qui donne:

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\tilde{Z} - Z}{\tau_Z}. \quad (5.41)$$

Ce qui décrit l'évolution des particules fluides pénétrant dans le réacteur. La solution de l'équation pour Z et en tenant compte de la valeur initiale suivant l'entrée $Z = Z_i$, est:

$$Z(t) = \tilde{Z} + (Z_i - \tilde{Z}) e^{-\frac{t}{\tau_Z}} \quad (5.42)$$

D'autres modèles de mélange auraient pu être utilisés, cependant ils ne mènent pas tous à une solution analytique du problème.

Nous empruntons au génie chimique la méthode de résolution dans le cas d'un réacteur homogène. Il s'agit d'exprimer la condition que, si le réacteur est bien mélangé, une particule a, à chaque instant, une probabilité équivalente de sortir. Soit $P(t)$, la densité de probabilité de temps de séjour d'une particule. La condition s'exprime par :

$$\frac{P(t+dt)}{\int_{t+dt}^{\infty} P(t')dt'} = \frac{P(t)}{\int_t^{\infty} P(t')dt'} = c$$

Après quelques calculs:

$$\frac{P(t+dt)}{P(t)} = \frac{\int_{t+dt}^{\infty} P(t')dt'}{\int_t^{\infty} P(t')dt'}$$

$$\frac{P(t+dt)}{P(t)} = 1 - \frac{\int_t^{t+dt} P(t')dt'}{\int_t^{\infty} P(t')dt'}$$

et comme la probabilité d'avoir $t \in [t, t+dt]$ est égale à $P(t)dt$ on a:

$$\frac{P(t+dt)}{P(t)} = 1 - dt \frac{P(t)}{\int_t^{\infty} P(t')dt'}$$

$$\frac{P(t+dt)}{P(t)} = 1 - cdt$$

$$\frac{P(t+dt) - P(t)}{dt} = -cP(t).$$

Finalement l'équation différentielle que doit suivre la probabilité de temps de séjour est:

$$\frac{dP(t)}{dt} = -cP(t).$$

La solution de cette équation est:

$$P(t) = Kexp(-ct)$$

où c et K sont des constantes. Elles sont déterminées grâce aux propriétés de la densité de probabilité:

$$\int_0^{\infty} P(t)dt = 1$$

et

$$\int_0^{\infty} tP(t)dt = t_s$$

où t_s est le temps de séjour moyen d'une particule dans le réacteur. Nous trouvons finalement $c = \frac{1}{t_s}$, soit la probabilité de temps de séjour:

$$P(t) = \frac{exp\left(-\frac{t}{t_s}\right)}{t_s} \quad (5.43)$$

Le domaine des Z est divisé en deux parties, l'une constituée des Z inférieurs à \tilde{Z} qui correspond à l'oxydant et l'autre des Z supérieurs à \tilde{Z} qui correspond au fuel. La répartition de la probabilité de Z_i à l'instant initial doit permettre de retrouver la moyenne égale à \tilde{Z} . De plus les seules entrées possibles sont :

- $Z_i = 0$ pour la partie oxydante;
- $Z_i = 1$ pour la partie des particules provenant du fuel gazeux;
- $Z_i = \overline{Z}_i$ pour la partie des particules provenant de l'évaporation du fuel liquide.

De cette façon il est possible de tenir compte directement de la nouvelle borne supérieure du domaine des Z , \overline{Z}_i . Cela impose dans le cas diphasique que $P(Z_i)$ la PDF des valeurs initiales de Z soit :

$$P(Z_i) = \frac{\overline{Z}_i - \tilde{Z}}{\overline{Z}_i} \delta(Z_i) + \frac{\tilde{Z}}{\overline{Z}_i} \delta(Z_i - \overline{Z}_i). \quad (5.44)$$

Nous avons les conditions initiales, une équation qui relie Z et t (5.42). De plus nous connaissons la PDF des temps de séjour $P(t)$ (5.43), finalement par quelques calculs nous obtenons exactement la fonction de densité de probabilité de Z en la reliant à celle de t par:

$$P(Z) \left| \frac{dZ(t)}{dt} \right| = P(t). \quad (5.45)$$

Il vient finalement [5.5.5]:

$$P(Z) = \begin{cases} \left(1 - \frac{\tilde{Z}}{\bar{Z}_i}\right) r \frac{(\tilde{Z}-Z)^{r-1}}{\tilde{Z}^r} & \text{si } Z < \tilde{Z}, \\ \left(\frac{\tilde{Z}}{\bar{Z}_i}\right) r \frac{(Z-\tilde{Z})^{r-1}}{(\bar{Z}_i-\tilde{Z})^r} & \text{si } \tilde{Z} < Z < \bar{Z}_i, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

où $r = \frac{\tau Z}{t_s}$.

Cette Pdf de Z ne dépend que du paramètre r et de la valeur moyenne de la variable de mélange. Nous avons calculé la variance de Z :

$$\frac{\widetilde{Z'^2}}{\widetilde{Z'^2}_{max}} = \frac{r}{r+2} \quad (5.46)$$

où $\widetilde{Z'^2}_{max} = \tilde{Z} (\bar{Z}_i - \tilde{Z})$ est la variance maximale de Z .

Cette équation relie $\widetilde{Z'^2}$ à r , ce qui fait que comme pour les formes de Pdf présumées classiques nous n'avons besoin que des deux premiers moments de Z . Notons qu'à la différence des formes de Pdf présumées usuelles (Pdf formées de pics et de rectangles, forme Beta,...) celle-ci est calculée à partir du modèle de mélange et du cas de référence que nous avons choisi et n'est pas présumée sur des considérations géométriques simplement. C'est l'avantage de cette méthode de construction qui laisse en plus la possibilité d'utiliser un modèle qui rendrait compte du mélange de façon plus réaliste. Le risque est de ne pas trouver une solution analytique pour $P(Z)$. Cependant il doit être possible de tabuler la fonction ainsi trouvée.

Nous avons représenté la Pdf de Z ainsi trouvée pour différentes valeurs du taux de ségrégation défini par:

$$S = \frac{\widetilde{Z'^2}}{\tilde{Z} (\bar{Z}_i - \tilde{Z})} \quad (5.47)$$

la variance de Z normalisée par la valeur maximum de cette variance. Les résultats correspondent à deux cas purement gazeux c'est-à-dire avec $\bar{Z}_i = 1$:

- fig.5.7 pour $\tilde{Z} = 0.5$;
- fig.5.8 pour $\tilde{Z} = 0.6$.

L'allure de ces Pdf est liée au modèle de mélange, nous avons utilisé le modèle IEM qui suppose que les particules se mélangent constamment avec la valeur moyenne de Z . Ce qui implique que la Pdf est très étroite autour de celle-ci. De plus cela provoque une discontinuité de pente en \tilde{Z} . Ces problèmes sont liés au modèle de mélange. Nous aurions retrouvé les mêmes

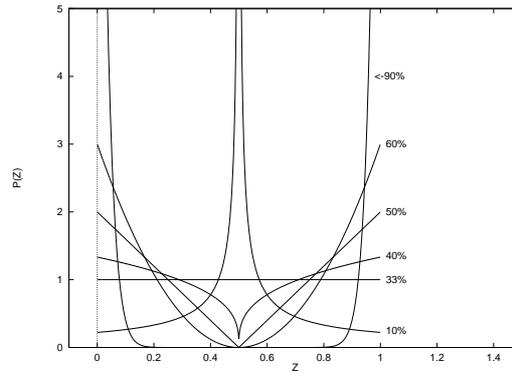


FIG. 5.7 – Pdf de Z pour différentes valeurs de S , $\tilde{Z} = 0.5$

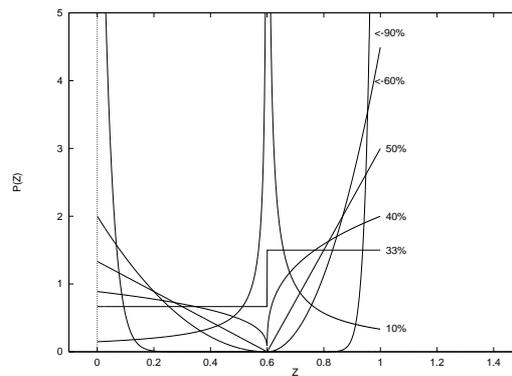


FIG. 5.8 – Pdf de Z pour différentes valeurs de S , $\tilde{Z} = 0.6$

défauts en intégrant l'équation de transport de $P(Z)$ avec le terme de micro-mélange modélisé de la même façon.

La Figure: 5.9 montre l'influence sur la forme de la PDF de la variable \bar{Z}_i . Sur la figure de gauche nous avons représenté les différentes PDF pour une valeur moyenne $\bar{Z} = 0.5$ correspondant à différents taux de ségrégation dans le cas gazeux ($\bar{Z}_i = 1$). Sur la figure de droite nous avons représenté le même genre de PDF mais dans un cas où le combustible qui s'évapore est déjà légèrement prémélangé quand il entre dans le milieu. La valeur choisie est $\bar{Z}_i = 0.8$ ce qui n'est pas une valeur très basse si l'on pense au type de combustibles utilisés dans un moteur Diesel. Ils sont en général très lourds et par conséquent sont à température ambiante très loin de leur point d'ébullition. L'influence de cette nouvelle borne supérieure du domaine des Z est très importante et l'on peut s'attendre à ce que son effet sur la combustion soit capital.

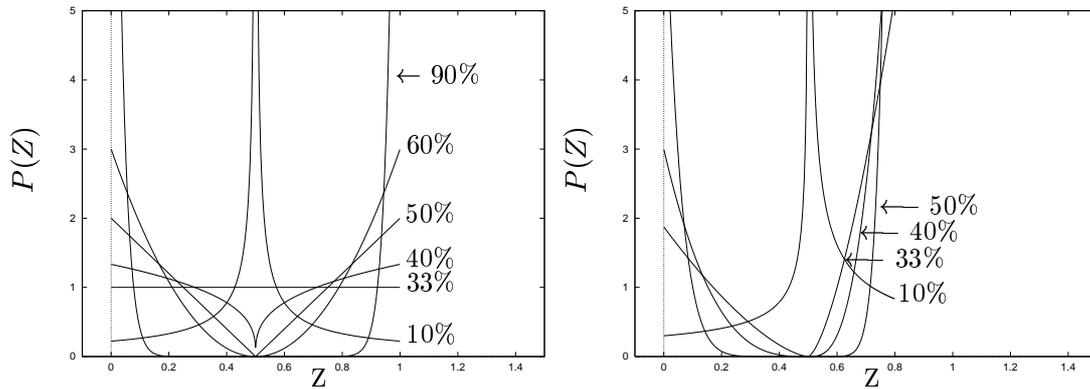
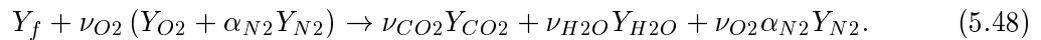


FIG. 5.9 – Forme de $P(Z)$ pour différentes valeurs de S avec à droite $\bar{Z}_i = 1.0$ et à gauche $\bar{Z}_i = 0.8$.

5.4 Calcul du taux de réaction moyen à partir de $P(Z)$

Maintenant que l'on a déterminé la PDF de Z il faut encore envisager les fluctuations des autres variables liées à Z . Nous envisagerons ici le cas d'une chimie qui peut être représentée par un mécanisme global à une étape:



Des extensions pourraient être apportées pour calculer d'autres espèces chimiques. Dans un premier temps nous utiliserons l'hypothèse de chimie infiniment rapide. Puis dans un deuxième temps nous utiliserons l'hypothèse de chimie infiniment brusque, qui correspond aux réactions ayant une température d'activation élevée, pour introduire des effets de chimie non infiniment rapide.

5.4.1 Chimie infiniment plus rapide que le mélange

Nous supposons dans cette section que la chimie est beaucoup plus rapide que le mélange. Dans ce cas pour une richesse donnée et des températures initiales données il est possible de calculer l'état d'équilibre thermochimique de la particule fluide. Cet état est toujours atteint et n'est pas perturbé par le mélange. Il permet de relier la fraction massique d'oxygène

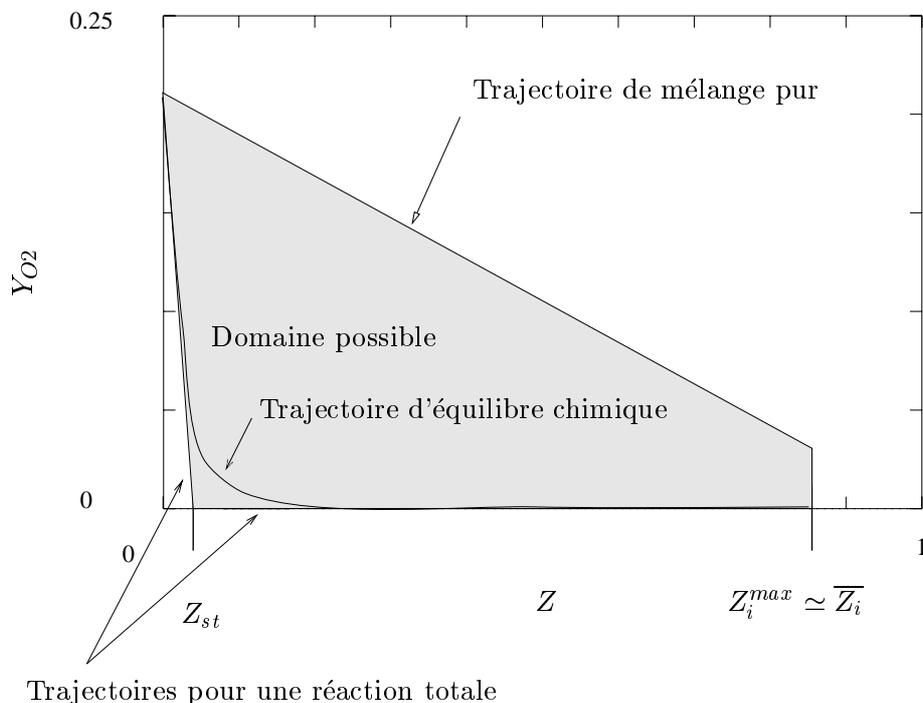


FIG. 5.10 – Espace des phases (Z, Y_{O_2}) représentant le domaine de réalisation possible pour des particules en train de brûler.

à la variable de mélange Z , et les autres quantités se déterminent de la même façon. La Figure: 5.10 représente le diagramme des phases projeté dans le plan (Z, Y_{O_2}) . La valeur de Z correspondant à la stœchiométrie est notée Z_{st} . Le domaine des réalisations possibles, c'est-à-dire l'endroit où il est possible de trouver des points de mesures simultanées de Z et de Y_{O_2} dans une flamme, est compris entre la droite de mélange pur et les segments de droite correspondant à une réaction unique totale. Le mélange pur est le cas où les particules qui se mélangent n'ont pas réagi. Le cas de la réaction totale correspond à des particules qui auraient réagi autant qu'il est possible pour la richesse donnée par Z . Elles ont consommé tout le combustible si le milieu est pauvre ou tout l'oxygène si le milieu est riche. Entre les deux il existe toutes sortes de trajectoires possibles suivant les flammes rencontrées et les interactions entre le mélange et la chimie. Notamment il y a la trajectoire qui correspond à des particules continuellement à l'équilibre chimique. Cette trajectoire est en général proche des trajectoires de la réaction totale, si bien que nous utiliserons ces dernières comme une bonne approximation de la trajectoire d'équilibre. Nous pouvons alors facilement calculer les équations reliant la fraction massique d'oxydant correspondant à une réaction totale ($Y_{O_2}^t$) en fonction de Z :

$$Y_{O_2}^t = \begin{cases} Y_{O_2}^m \left(1 - \frac{\tilde{Z}}{Z_{st}}\right) + \frac{Y_{O_2}^m}{Z_{st}} (\tilde{Z} - Z) & \text{si } Z < Z_{st}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

où $Y_{O_2}^m$ est la valeur maximale de la fraction massique d'oxygène. Cette relation nous permet de relier directement Y_{O_2} comme une fonction de Z . Il existe alors deux façons de calculer l'évolution de la fraction massique d'oxygène moyenne.

La première est de relier directement la fraction massique moyenne comme l'intégrale du produit de la fonction $Y_{O_2}(Z)$ que multiplie la PDF de Z :

$$\widetilde{Y}_{O_2} = \int_0^{\widetilde{Z}_i} Y_{O_2}(Z)P(Z)dZ. \quad (5.49)$$

Comme les formes analytiques des fonctions $Y_{O_2}(Z)$ et $P(Z)$ sont connues, il est possible d'intégrer analytiquement cette équation afin d'obtenir la formulation de \widetilde{Y}_{O_2} :

$$\widetilde{Y}_{O_2} = \begin{cases} \left(1 - \frac{\widetilde{Z}}{\widetilde{Z}_i}\right) Y_{O_2}^m + \frac{Y_{O_2}^m}{r+1} \left(1 - \frac{\widetilde{Z}}{\widetilde{Z}_i}\right) \frac{\widetilde{Z}}{Z_{st}} \left(\left(1 - \frac{Z_{st}}{\widetilde{Z}}\right)^{r+1} - 1 \right) & \text{si } Z_{st} < \widetilde{Z}, \\ \left(1 - \frac{\widetilde{Z}}{\widetilde{Z}_i}\right) Y_{O_2}^m \left[1 + \frac{\widetilde{Z}}{\widetilde{Z}_i - \widetilde{Z}} \left(\frac{Z^* - \widetilde{Z}}{\widetilde{Z}_i - \widetilde{Z}} \right)^r \left(1 - \frac{Z^*}{Z_{st}}\right) + \frac{\widetilde{Z}}{(r+1)Z_{st}} \left[\left(\frac{Z^* - \widetilde{Z}}{\widetilde{Z}_i - \widetilde{Z}} \right)^{r+1} - 1 \right] \right] & \text{sinon,} \end{cases} \quad (5.50)$$

où $Z^* = \min(\widetilde{Z}_i, Z_{st})$.

La deuxième façon de calculer l'évolution des variables réactives consiste à calculer le taux de réaction moyen et d'utiliser une équation de transport pour la fraction massique moyenne, c'est cette façon qui est employée dans la méthode MIL [11]. Les équations Lagrangiennes qui décrivent le milieu sont fermées avec le modèle de mélange IEM:

$$\frac{dY_{O_2}}{dt} = \frac{\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}}{\tau_t} + \omega_c(Y_{O_2}, Z, \widetilde{Z}, \widetilde{Y}_{O_2}) \quad (5.51)$$

et

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\widetilde{Z} - Z}{\tau_t}. \quad (5.52)$$

Ces équations dépendent de t mais nous pouvons relier les solutions $Y_{O_2}(t)$ et $Z(t)$ entre elles pour supprimer le temps :

$$\frac{dY_{O_2}}{dZ} = \frac{\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}}{\widetilde{Z} - Z} + \tau_t \frac{\omega_c(Y_{O_2}, Z, \widetilde{Z}, \widetilde{Y}_{O_2})}{\widetilde{Z} - Z} \quad (5.53)$$

Le taux de réaction à partir de cette équation s'exprime:

$$\omega_c(Y_{O_2}, Z, \widetilde{Z}, \widetilde{Y}_{O_2}) = \frac{dY_{O_2}}{dZ} \frac{\widetilde{Z} - Z}{\tau_Z} - \frac{\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}}{\tau_Z}. \quad (5.54)$$

L'hypothèse de chimie infiniment rapide nous donne la fraction massique d'oxygène en fonction de Z :

$$Y_{O_2} = Y_{O_2}^t(Z). \quad (5.55)$$

Ce qui permet de calculer le taux de réaction instantané d'oxygène:

$$\omega_c(Z) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_Z} \left[-\frac{Y_{O_2}^m}{Z_{st}} (\widetilde{Z} - Z) - (\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}^t(Z)) \right] & \text{si } Z < Z_{st}, \\ \frac{1}{\tau_Z} \left[-(\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}^t(Z)) \right] & \text{si } Z_{st} < Z < \widetilde{Z}_i. \end{cases}$$

Il reste cependant le cas particulier de la limite supérieure \widetilde{Z}_i : si à l'endroit où le fuel s'évapore il reste de l'oxygène les particules fluides issues de ce mélange vont instantanément rejoindre le segment de droite correspondant à une réaction totale.

Prenons par exemple le cas du réacteur homogène non parfaitement mélangé avec une entrée correspondant à $Z = \bar{Z}_i$. Par hypothèse ce prémélange est soit brûlé soit non brûlé en entrée. Dans le cas où le mélange est non brûlé en entrée, l'hypothèse de chimie infiniment rapide impose qu'il réagisse instantanément dès qu'il est dans le réacteur. C'est-à-dire que dans l'espace des phases, Figure: 5.10, la trajectoire des particules commence sur la droite de mélange pur en $Z = \bar{Z}_i$ puis descend verticalement vers le segment de droite correspondant à une réaction totale et suit cette trajectoire. Durant le saut d'une trajectoire à l'autre, la dérivée par rapport à Z est infinie. En ce point la formule du taux de réaction (5.54) nous donne:

$$\omega_c(\bar{Z}_i) = \frac{1}{\tau_Z} \left[\left(Y_{O_2}^u(\bar{Z}_i) - Y_{O_2}^t(\bar{Z}_i) \right) \left(\tilde{Z} - Z \right) \delta \left(Z - \bar{Z}_i \right) - \left(\tilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}^t(Z) \right) \right], \quad (5.56)$$

où $Y_{O_2}^u(\bar{Z}_i) = Y_{O_2}^m \left(1 - \bar{Z}_i \right)$ est la valeur de la fraction massique d'oxygène sur la trajectoire de mélange pur en $Z = \bar{Z}_i$. La dérivée infinie est représentée par une fonction de Dirac que multiplie le saut d'une trajectoire à l'autre.

On peut alors calculer le taux de réaction moyen comme l'intégrale:

$$\tilde{\omega}_c = \int_0^{\bar{Z}_i} \omega_c(Z) P(Z) dZ. \quad (5.57)$$

La simplicité du modèle IEM et la forme de PDF qui en découle permettent une intégration analytique du taux de réaction moyen:

$$\tilde{\omega}_c = \begin{cases} \frac{Y_{O_2}^m}{\tau_Z} \left(1 - \frac{\tilde{Z}}{\bar{Z}_i} \right) \left(\frac{r}{r+1} \frac{\tilde{Z}}{Z_{st}} \left(1 - \frac{Z_{st}}{\tilde{Z}} \right)^{r+1} - 1 \right) + \tilde{\omega}_c^j & \text{si } Z_{st} < \tilde{Z}, \\ \frac{Y_{O_2}^m}{\tau_Z} \left(1 - \frac{\tilde{Z}}{\bar{Z}_i} \right) \left[\frac{r}{r+1} \frac{\tilde{Z}}{Z_{st}} \left[\left(\frac{Z_{st} - \tilde{Z}}{\bar{Z}_i - \tilde{Z}} \right)^{r+1} - 1 \right] \right] + \tilde{\omega}_c^j & \text{sinon,} \end{cases} \quad (5.58)$$

où $\tilde{\omega}_c^j$ est le taux de réaction dû au saut de trajectoire en $Z = \bar{Z}_i$. Il s'exprime comme:

$$\tilde{\omega}_c^j = \begin{cases} Y_{O_2}^m \left(\tilde{Z} - \frac{\tilde{Z}}{Z_{st}} \right) \frac{r}{\tau_Z} & \text{si } \bar{Z}_i < Z_{st}, \\ Y_{O_2}^m \left(\tilde{Z} - \frac{\tilde{Z}}{\bar{Z}_i} \right) \frac{r}{\tau_Z} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.59)$$

Pour analyser les différences qu'il y a entre les deux méthodes il est utile de considérer le cas du réacteur homogène non parfaitement mélangé Figure: 5.6. Les équations de bilan intégrées entre l'entrée et la sortie du réacteur nous donnent, pour la fraction massique d'oxygène :

$$\tilde{Y} = \tilde{Y}_i + t_s \tilde{\omega}_c \quad (5.60)$$

Dans ce cas, cette équation remplace l'équation de transport de la fraction massique moyenne d'oxygène. Cela permet de comparer la méthode 1 qui calcule directement la fraction massique moyenne d'oxygène avec la méthode 2 qui calcule le taux de réaction moyen qui est ensuite introduit dans l'équation de transport pour calculer la fraction massique moyenne d'oxygène. Dans le cas du réacteur homogène non prémélangé la forme de la PDF est calculée en utilisant le même modèle de micro-mélange que celui utilisé dans l'équation pour Y_{O_2} . Les deux méthodes reposent sur des hypothèses identiques et devraient théoriquement donner le même résultat. Et en effet on trouve bien après quelques calculs que:

$$\tilde{Y}_{O_2}^1 \left(\tilde{Z}, \tilde{Z}^{r^2}, \tau_Z \right) = \tilde{Y}_{O_2}^2 \left(\tilde{Z}, \tilde{Z}^{r^2}, \tau_Z \right) = \tilde{Y}_{O_2}^i + t_s \tilde{\omega}_c \left(\tilde{Z}, \tilde{Z}^{r^2}, \tau_Z \right), \quad (5.61)$$

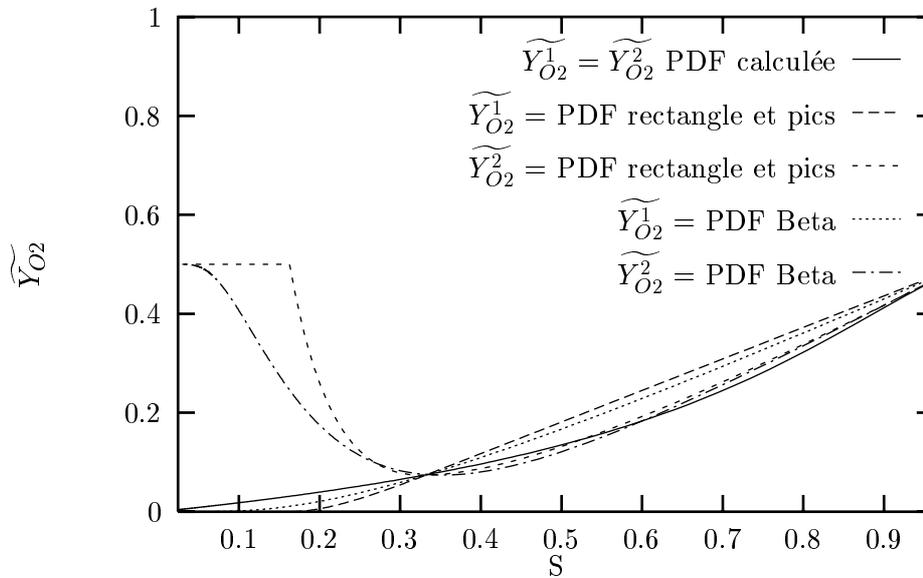


FIG. 5.11 – Comparaison de la méthode de calcul de \widetilde{Y}_{O_2} quand la forme de la PDF présumée change

où

- $\widetilde{Y}_{O_2}^1$ est calculé suivant l'équation (5.4.1);
- $\widetilde{Y}_{O_2}^2$ est calculé avec l'équation de bilan (5.60) et le taux de réaction moyen des équations (5.4.1) et (5.4.1).

Cependant on peut s'attendre à ce que dans le cas d'un foyer quelconque la forme de la PDF calculée dans le cas du réacteur homogène non parfaitement prémélangé n'approxime pas parfaitement la forme réelle. Dans ce cas il est intéressant de connaître l'écart entre les deux méthodes et leur sensibilité aux erreurs de forme de PDF. Pour simuler cela, on utilise des formes de PDF qui ne sont pas exactement celles calculées dans le réacteur homogène, mais qui sont réputées pour être de bonnes approximations de la PDF de Z dans le cas gazeux, Figure: 5.11 . Nous utiliserons les formes composées de pics et de rectangles, voir par exemple [13] [77], et une autre forme couramment utilisée de type β eta, voir [46]. Puisque ces formes n'ont été validées que dans le cas gazeux, les comparaisons se feront pour différentes valeurs du taux de ségrégation S mais avec $\overline{Z}_i = 1$. La valeur moyenne de Z est $\widetilde{Z} = 0.5$ et la valeur maximale de la fraction massique d'oxygène est $Y_{O_2}^m = 0.5$.

La ligne continue représente la fraction massique moyenne obtenue avec la Pdf calculée précédemment dans le cas du réacteur homogène suivant les deux méthodes. Comme prévu les deux méthodes donnent le même résultat. Si on utilise des formes de PDF différentes les deux méthodes ne donnent pas le même résultat (pour \widetilde{Y}_{O_2}). L'écart entre toutes les courbes $\widetilde{Y}_{O_2}^1$ reste faible avec la méthode 1 même si les formes de PDF sont très différentes. La méthode 2 qui consiste à calculer le taux de réaction moyen est la plus sensible aux changements de forme de la PDF. Cela semble dû à une accumulation de l'erreur dans le calcul du taux de réaction moyen, celle-ci allant toujours dans le même sens au cours du temps, puisque dans le cas du réacteur homogène le taux de réaction moyen est constant au cours du temps. Manifestement

donc l'utilisation de la méthode 2 peut permettre de plus grandes erreurs. Mais cela ne permet pas de dire que la méthode 2 est toujours plus mauvaise et peut entraîner de grosses erreurs, puisque dans un cas réel, les conditions changent d'un endroit à l'autre de l'écoulement et qu'ainsi il est possible que l'erreur se fasse dans un sens ou dans l'autre finissant par s'annuler. Cependant ce calcul montre que si l'on veut approcher le taux de réaction moyen il faut vérifier que l'erreur d'approximation ne se fasse pas toujours dans le même sens.

De toute façon il semble préférable, dans le cas où on peut, de calculer directement la moyenne de la fraction massique d'oxygène à partir de la réaction massique d'oxygène fonction de Z . De cette manière, on peut penser que la forme de la PDF choisie même comprenant des erreurs n'influencera pas trop les résultats.

5.4.2 Chimie infiniment brusque, à haute énergie d'activation globale

Le modèle MIL proposé par Borghi et Gonzales [11] a pour but de simuler la combustion turbulente d'une flamme de diffusion pour des types de flammes assez étendus, allant de l'allumage à une combustion proche de l'équilibre. Pour cela il faut prendre en compte certains aspects chimiques et renoncer à l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide. Ceci ne rend plus possible la description complète de la flamme grâce au seul scalaire Z .

Il faut alors considérer au minimum deux scalaires avec l'hypothèse de flamme adiabatique (et $\mathcal{L}e = 1$). Les deux scalaires peuvent être un scalaire qui décrit le mélange (Z) et un scalaire donnant l'état d'avancement de la réaction (C). La Pdf jointe de ces deux scalaires permet avec l'hypothèse supplémentaire d'une réaction unique de calculer le taux de réaction moyen, la fraction massique moyenne de combustible, de comburant et des produits. Des ajustements peuvent être ensuite faits pour prendre en compte des espèces minoritaires grâce à des hypothèses supplémentaires sur la cinétique chimique. On peut avec ce modèle traiter les cas de chambre de combustion qui contiennent en même temps des flammes de diffusion, de prémélange en milieu inhomogène ou non.

Dans le cas minimum il faut donc connaître $P(C, Z)$.

Il faut présumer la forme de cette Pdf, si l'on ne veut pas résoudre complètement l'équation de transport pour cette Pdf jointe. Le plus simple serait d'étendre les méthodes présumées pour une PDF d'une dimension à deux dimensions. Il y a principalement deux difficultés.

- La première est d'écrire une équation de transport pour C . Dans le cas prémélangé cela ne pose pas de problème: une définition habituelle de C est par exemple:

$$C = \frac{Y_{O_2}^u - Y_{O_2}}{Y_{O_2}^u - Y_{O_2}^t}, \quad (5.62)$$

où

- $Y_{O_2}^u$ est la valeur de Y_{O_2} projetée sur la trajectoire de mélange pur;
- $Y_{O_2}^t$ est la valeur de Y_{O_2} projetée sur la trajectoire de réaction totale, voir Figure: 5.4.1.

Les deux fonctions $Y_{O_2}^u$ et $Y_{O_2}^t$ ne dépendent que de Z . Ainsi la variable C habituelle, qui doit être utilisée si l'on veut étendre les formes de PDF utilisées dans le cas de la combustion prémélangée, dépend de Z de façon non linéaire puisqu'elle est divisée par une fonction de Z . Il apparaît dès l'équation de \tilde{C} des termes de types $\frac{1}{Z}$ qui ne sont pas fermés.

- La deuxième difficulté consiste à présumer une PDF à deux dimensions. Pour pouvoir utiliser les formes approchées de PDF trouvées dans les cas à une dimension il faut supposer l'indépendance statistique des deux variables:

$$P(C, Z) = P(C)|_Z P(Z) = P(C)P(Z) \quad (5.63)$$

Alors il suffit de présumer $P(C)$ et $P(Z)$ de façon habituelle. Mais cette indépendance n'est pas justifiée. On s'attend en effet que les particules dont la richesse est proche de l'unité brûleront plus vite que les autres et que donc $\tilde{C}|_Z$ sera plus grand quand $Z = Z_s$, ce qui ne sera pas le cas avec l'indépendance statistique.

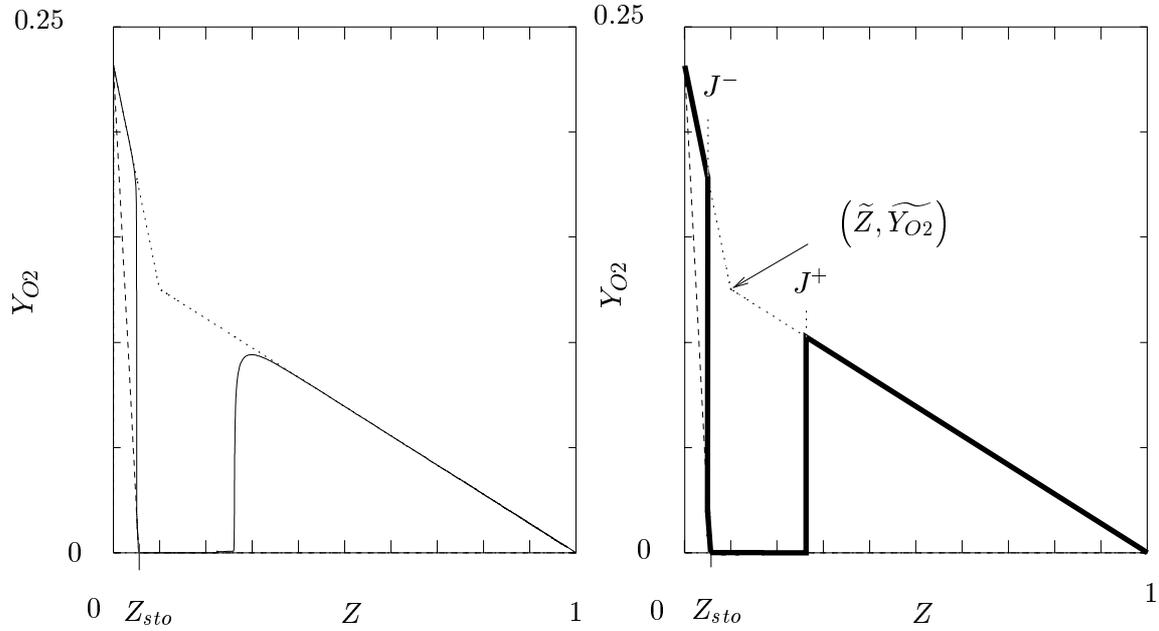
Comme on le voit, il n'est pas possible d'étendre de façon simple les méthodes de PDF présumée de une à deux dimensions. On peut par contre utiliser une hypothèse physique pour cela. C'est ce qui est fait quand on suppose que la chimie est infiniment rapide. Cette hypothèse entraîne que la Pdf de C est un pic de dirac en 1. Il est alors possible de présumer la Pdf de Z qui est à une dimension par les méthodes habituelles [5.4.1].

Le modèle MIL [11] utilise aussi une hypothèse physique pour relier la deuxième variable à Z . C'est l'hypothèse de chimie infiniment brusque, qui corespond aux réactions chimique qui ont globalement une haute énergie d'activation. C'est-à-dire qu'une particule fluide met un temps non nul pour s'enflammer mais qu'une fois enflammée elle brûle entièrement en un temps très petit. Cela revient pour la PDF de C à être composée de deux pics, un en 0 et un autre en 1. En fait comme on n'utilise plus une forme de PDF qui avait cours dans le cas des flammes parfaitement prémélangées, il n'est plus nécessaire d'utiliser une variable adimensionnée comme C . Le dégagement de chaleur étant principalement lié à la consommation d'oxygène c'est directement cette variable que nous choisisons. La PDF de Y_{O_2} conditionnée par Z sera alors composée d'un pic de Dirac en $Y_{O_2}^u(Z)$ et un autre en $Y_{O_2}^t(Z)$.

En utilisant le modèle IEM, il est possible de décrire l'évolution des particules fluides dans l'espace des phases (Z, Y_{O_2}) . Celles-ci apparaissent aux points correspondants à leur valeur initiale du couple (Z, Y_{O_2}) , soit, sur la Figure: 5.12, les couples $(0;0.23)$ et $(1;0)$. Elles suivent alors une trajectoire de mélange avec la moyenne qui les rapproche du point $(\tilde{Z}, \tilde{Y}_{O_2})$. Cela dure un temps fini, jusqu'à ce qu'elles s'enflamment. Elles sont alors projetées instantanément à $Z = cste$ sur les trajectoires de réaction totale $Y_{O_2}^t$. Ces trajectoires, utilisant l'hypothèse de chimie infiniment brusque, sont représentées à droite de la Figure: 5.12. La partie gauche montre les trajectoires calculées en résolvant les équations Lagrangiennes (5.51) et (5.42) où le terme de micro mélange a été modélisé avec le modèle IEM pour une certaine valeur de τ_Z . Le combustible utilisé est le méthane et le taux de réaction instantanée est calculé avec une loi d'Arrhenius pour la réaction globale. Les constantes de cette loi sont extraites de l'article de Westbrook [109]. Plus la température d'activation est forte plus les sauts sont marqués et plus l'approximation de chimie infiniment brusque est valide.

Il apparaît une trajectoire supplémentaire, $Y_{O_2}^{IEM}(Z)$ qui décrit le mélange avec la moyenne et qui sert de support aux trajectoires des particules fluides avant qu'elles ne s'enflamment. L'équation de cette trajectoire est:

$$Y_{O_2}^{IEM}(Z) = \begin{cases} Y_{O_2}^m - \left(\frac{Y_{O_2}^m - \tilde{Y}_{O_2}}{Z} \right) Z & \text{si } Z < \tilde{Z}, \\ \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{1-Z} - \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{1-Z} Z & \text{sinon} \end{cases}$$



Trajectoires calculées

Trajectoires approchées

FIG. 5.12 – Schéma de l'approximation faite en utilisant l'hypothèse de chimie infiniment brusque, (haute énergie d'activation globale)

Ainsi dans le cas d'une chimie brusque il y a une liaison directe entre Y_{O_2} et Z :

$$Y_{O_2}(Z) = \begin{cases} Y_{O_2}^{IEM} & \text{si } Z < J^-, \\ Y_{O_2}^t & \text{si } J^- < Z < J^+, \\ Y_{O_2}^{IEM} & \text{si } J^+ < Z. \end{cases}$$

Pour déterminer l'emplacement des sauts J^- et J^+ , il faut comparer le temps de mélange et un temps chimique "d'allumage". Borghi et *al* [11] ont considéré une PDF de temps de mélange $\tau = \tau_Z$:

$$P(\tau) = \begin{cases} \frac{e^{-\frac{\tau-\tau_K}{\tau_t-\tau_K}}}{\tau_t-\tau_K} & \text{si } \tau_K < \tau, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

où τ_t est l'échelle de temps intégrale de la turbulence et τ_K est l'échelle de temps de Kolmogorov. Ceci permet de rendre aléatoires les points J^+ et J^- , avec une certaine PDF, mais l'utilisation de cette PDF de temps de mélange nécessite une intégration numérique du taux de réaction moyen ou de la fraction massique moyenne des espèces. Aussi, pour plus de simplicité nous utiliserons ici un temps de mélange unique τ_Z proportionnel à τ_t . Cependant lors de l'implémentation numérique du modèle nous avons inclus la possibilité d'utiliser cette PDF de temps de mélange.

Pour déterminer le temps d'allumage il faut calculer le taux de réaction intantané le long de la trajectoire de mélange avec la moyenne. Il est possible de calculer au préalable les taux de réactions et ainsi utiliser une chimie aussi complexe que l'on veut même en ne considérant que la valeur du taux de réaction de l'oxygène. L'équation (5.53) peut se réécrire sous la

forme:

$$\frac{dY_{O_2}}{dZ} = \frac{\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}}{\widetilde{Z} - Z} \left(1 + \tau_Z \frac{\omega_c(Y_{O_2}, Z, \widetilde{Z}, \widetilde{Y}_{O_2})}{\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}} \right), \quad (5.64)$$

où $\frac{\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}}{\widetilde{Z} - Z}$ est le terme qui porte les trajectoires des particules fluides vers la moyenne. Du moment que ce terme est dominant les particules se déplacent vers la moyenne. En première approximation l'emplacement du saut correspond aux valeurs de Z où:

$$\tau_Z \frac{\omega_c(Y_{O_2}^{IEM}, Z, \widetilde{Z}, \widetilde{Y}_{O_2})}{Y_{O_2}^{IEM} - Y_{O_2}} = O(1), \quad (5.65)$$

où $O(1)$ est une constante proche de l'unité à déterminer pour J^- et J^+ .

On peut aussi résoudre les équations Lagrangiennes (5.51) et (5.42) et relever l'emplacement du saut, Figure: 5.12. Il est alors possible d'utiliser pour cela des chimies complexes dans des conditions de température et de mélange données et ainsi créer une bibliothèque d'emplacements des sauts, [85] [84].

Nous avons vérifié que l'approximation (5.65) pour calculer l'emplacement des sauts de trajectoires se comparait de façon raisonnable avec l'emplacement relevé quand on résout réellement les équations. Pour cela nous avons calculé le saut du côté inférieur à \widetilde{Z} des deux façons en faisant varier le temps de mélange, Figure: 5.13. Dans ce cas $\widetilde{Z} = 0.15$ on observe

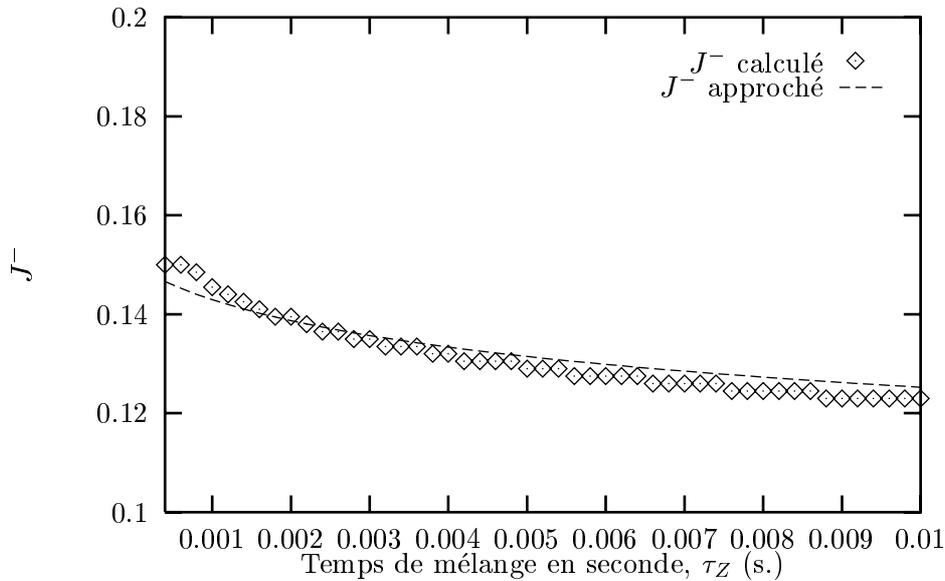


FIG. 5.13 – Comparaison entre l'emplacement du saut calculé en résolvant les équations (5.51) et (5.42) (J^- calculé) et celui approché en utilisant la relation (5.65), quand on fait varier le temps de mélange.

que plus le temps de mélange est petit plus le saut se fait près de la valeur moyenne de Z . Ce qui veut dire que le domaine des Z où la trajectoire de Y_{O_2} correspond à celle de la réaction totale est de plus en plus petit, et donc le milieu a en moyenne de moins en moins réagi.

Comme dans le cas de la chimie infiniment rapide, maintenant que l'on connaît une relation qui lie Y_{O_2} et Z , il y a deux méthodes pour calculer l'évolution de la fraction massique moyenne d'oxygène.

La méthode 1 consiste en l'intégration directe de la fraction massique d'oxygène, fonction de Z , pondérée par la PDF de Z :

$$\widetilde{Y}_{O_2} = \int_0^{J^-} Y_{O_2}^{IEM}(Z, \widetilde{Y}_{O_2}, \tau_Z) P(Z) dz + \int_{J^-}^{J^+} Y_{O_2}^t(Z) P(Z) dz + \int_{J^+}^{\overline{Z}_i} Y_{O_2}^{IEM}(Z, \widetilde{Y}_{O_2}, \tau_Z) P(Z) dz. \quad (5.66)$$

Avec la forme de PDF, présumée précédemment, cette intégration se fait de façon analytique, cependant il y a plusieurs cas possibles suivant les valeurs respectives de \widetilde{Z} , Z_s , J^- , J^+ et \overline{Z}_i , ce qui rend fastidieux l'écriture de tous les résultats.

La méthode 2 consiste à intégrer le taux de réaction moyen de façon à l'incorporer dans une équation de transport de la fraction massique moyenne. Le taux de réaction d'oxygène en fonction de Z est obtenu à partir des trajectoires de $Y_{O_2}(Z)$ et de l'équation (5.54), ce qui donne:

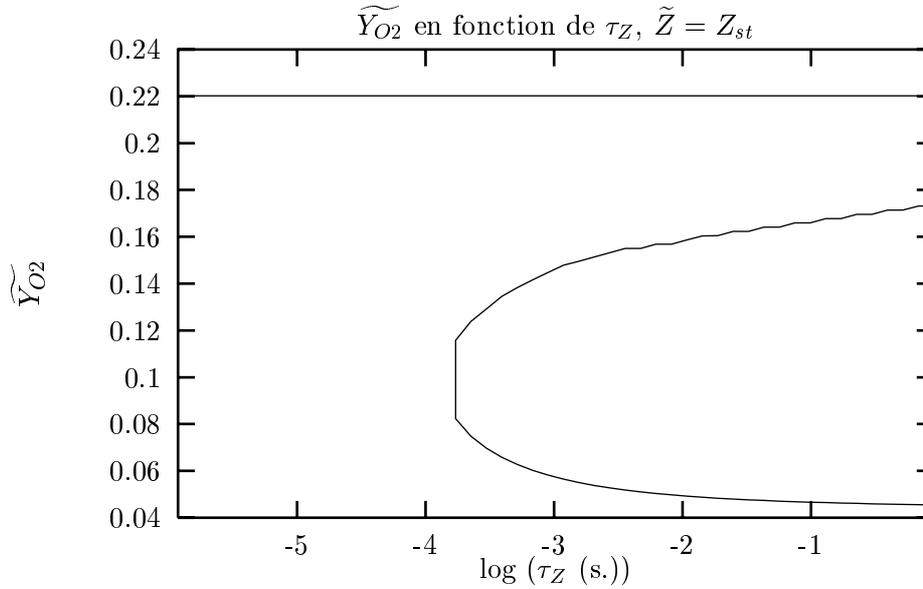
$$\begin{aligned} \widetilde{\omega}_c = & \int_0^{J^-} \omega_c(Z, Y_{O_2}^{IEM}, \widetilde{Y}_{O_2}, \tau_Z) P(Z) dz + \widetilde{\omega}_c^{J^-} \\ & + \int_{J^-}^{J^+} \omega_c(Z, Y_{O_2}^t, Z, \widetilde{Y}_{O_2}, \tau_Z) P(Z) dz \\ & + \int_{J^+}^{\overline{Z}_i} \omega_c(Z, Y_{O_2}^{IEM}, \widetilde{Y}_{O_2}, \tau_Z) P(Z) dz + \widetilde{\omega}_c^{J^+}, \end{aligned}$$

où $\widetilde{\omega}_c^{J^-}$ et $\widetilde{\omega}_c^{J^+}$ sont les taux de réaction supplémentaires dus aux sauts en J^- et J^+ , comme en [5.4.1]

Ces deux méthodes sont, comme dans le cas de la chimie infiniment rapide, équivalentes si l'on regarde le cas du réacteur homogène non parfaitement mélangé pour lequel a été calculé la PDF de Z . Cependant il faut remarquer qu'à cause de l'utilisation de la trajectoire d'échange avec la moyenne l'équation de la fraction massique moyenne est transcendante. Cette équation est résolue dans le cas du réacteur homogène pour un certain temps de séjour t_s . Figure: 5.14. La solution de cette équation en fonction du temps de mélange montre une courbe en 'S' caractéristique d'un phénomène d'allumage: Si le temps de mélange est trop petit la solution de l'équation de \widetilde{Y}_{O_2} donne une valeur de la fraction massique d'oxygène maximale, c'est-à-dire qui n'a pas brûlé. Puis il y a une zone où, à un temps de mélange donné, correspondent trois solutions de \widetilde{Y}_{O_2} . La solution maximum correspond à l'extinction. La solution intermédiaire n'est pas stable, elle marque la frontière entre le cas éteint et allumé. La solution la plus basse correspond à un réacteur allumé.

Ce comportement est entièrement réaliste et montre que le modèle MIL basé sur la chimie infiniment brusque est capable de prendre en compte des phénomènes liés aux interactions entre le mélange et la réaction chimique. Mais si nous considérons maintenant un foyer non homogène et que nous appliquons la méthode 1, elle ne pourra nous donner la solution. En effet, il est nécessaire de connaître le champ voisin ou légèrement antérieur de \widetilde{Y}_{O_2} pour pouvoir calculer sa valeur en un point donné, ce qui n'entre pas en compte dans l'utilisation de la méthode 1. Sans résoudre une équation de transport pour \widetilde{Y}_{O_2} il n'est pas possible de connaître ce champ voisin. L'utilisation d'une équation de transport nécessite de calculer son taux de réaction moyen $\widetilde{\omega}_c$ qui peut dépendre de \widetilde{Y}_{O_2} . Il est donc nécessaire d'utiliser la méthode 2, malgré sa sensibilité plus forte aux formes de PDF présumée.

Dans un foyer homogène, les méthodes 1 et 2 donnent le même résultat, mais ce n'est plus le cas dans un foyer non homogène. Cela peut être dû simplement à la forme de la PDF présumée qui n'est pas connue exactement ici, mais aussi à des effets d'inhomogénéité spatiale.

FIG. 5.14 – Courbe en 'S' de \widetilde{Y}_{O_2}

Dans la réalité il y a des particules sur des trajectoires supplémentaires à celles prévues par le modèle MIL en fonction des grandeurs moyennes. Afin d'en tenir compte, nous ajouterons donc une probabilité que des particules soient sur les trajectoires de la réaction totale si la fraction massique moyenne calculée en suivant les trajectoires prévues par le modèle MIL, $\widetilde{Y}_{O_2}^{MIL}$, est supérieur à \widetilde{Y}_{O_2} . Si au contraire $\widetilde{Y}_{O_2}^{MIL}$ est inférieur à \widetilde{Y}_{O_2} , nous ajouterons une probabilité pour qu'une partie des particules soient sur la trajectoire de mélange pur. Cette probabilité sera ajustée pour que les méthodes 1 et 2 donnent les mêmes résultats, quelque soit le type de foyer. Les particules sur les trajectoires de la réaction totale contribuent alors au taux de réaction totale en proportion de leur probabilité.

Finalement le schéma proposé du calcul du taux de réaction chimique est représenté sur la Figure: 5.15.

1. On calcule l'emplacement des sauts et les trajectoires des particules selon le modèle MIL. Cela permet d'obtenir les valeurs du taux de réaction moyen selon MIL $\widetilde{\omega}_c^{MIL} + \widetilde{\omega}_c^{Jump}$ et la fraction massique moyenne selon MIL $\widetilde{Y}_{O_2}^{MIL}$. Le taux de réaction dû aux sauts des trajectoires $\widetilde{\omega}_c^{Jump}$ est séparé du taux de réaction moyen. Le calcul de toutes ces quantités est fait de façon analytique en utilisant la PDF présumée dans le réacteur homogène pour Z et un seul temps de mélange moyen. Il est possible d'utiliser une PDF de temps de mélange pour mieux représenter les différentes échelles des fluctuations, mais dans ce cas l'intégration des quantités moyennes selon MIL se fait de façon numérique.
2. On compare $\widetilde{Y}_{O_2}^{MIL}$ à la fraction massique moyenne donnée par l'équation de transport \widetilde{Y}_{O_2} . Si ces deux variables sont différentes il faut ajouter des points sur d'autres trajectoires. La fraction massique moyenne et le taux de réaction moyen de ces points rajoutés sont: $\widetilde{Y}_{O_2}^*$ et $\widetilde{\omega}_c^*$
 - Si $\widetilde{Y}_{O_2}^{MIL} < \widetilde{Y}_{O_2}$, on ajoute des points sur la trajectoire de mélange pur. Le taux de

réaction $\widetilde{\omega}_c^*$ sur cette trajectoire est nul.

- Si $\widetilde{Y}_{O_2} < Y_{O_2}^{MIL}$, on ajoute des points sur la trajectoire de réaction totale. Le taux de réaction $\widetilde{\omega}_c^*$ sur cette trajectoire est égale au taux de réaction calculé en supposant une chimie infiniment rapide.

Le poids probabiliste de l'ensemble de ces points est:

$$\alpha = \frac{\widetilde{Y}_{O_2} - Y_{O_2}^{MIL}}{\widetilde{Y}_{O_2}^* - Y_{O_2}^{MIL}}. \quad (5.67)$$

3. Le taux de réaction moyen est alors calculé comme la somme du taux de réaction moyen suivant MIL, plus le taux de réaction moyen des points rajoutés pondéré par le poids probabiliste des particules ajoutées, plus le taux de réaction dû aux sauts:

$$\widetilde{\omega}_c = (1 - \alpha)\omega_c^{MIL} + \alpha\widetilde{\omega}_c^* + \omega_c^{Jump}. \quad (5.68)$$

Le taux de réaction dû aux sauts représente l'auto-inflammation de particules qu'elles fassent partie ou non des particules rajoutées, c'est pourquoi il a toujours lieu.

Finalement dans le cas de la chimie non infiniment rapide il faut utiliser les méthodes 1 et 2 pour avoir suffisamment d'information.

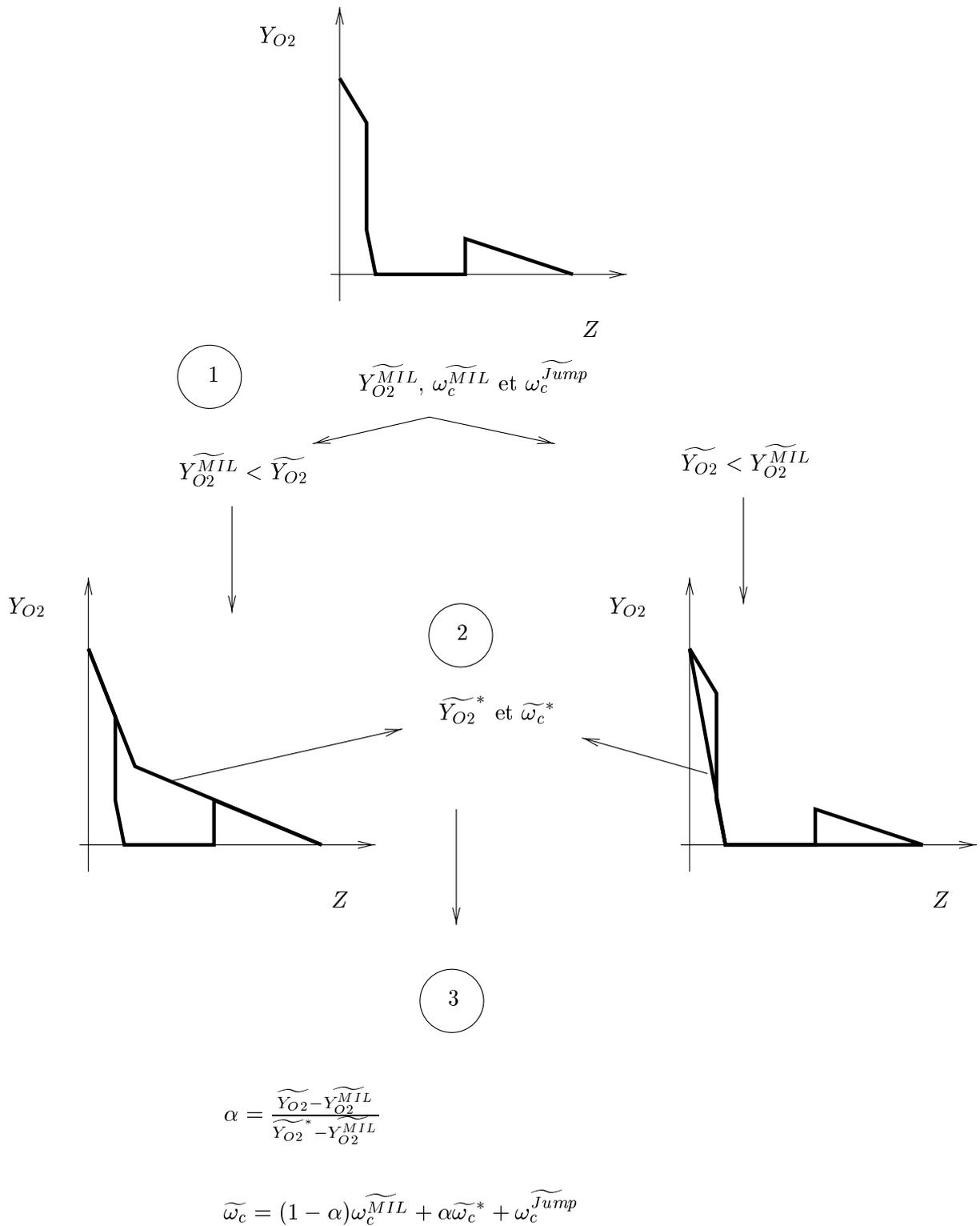


FIG. 5.15 - Schéma du modèle

5.5 Annexe

5.5.1 Annexe: calcul de l'équation de transport de \widetilde{Z}^{i2} à partir de l'équation exacte pour Z

A partir de l'équation pour Z nous obtenons celle pour \widetilde{Z}^2 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} &= \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) + \dot{\omega}_v \\ 2Z \times \frac{\partial \rho Z}{\partial t} + 2Z \times \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} &= 2Z \times \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) + 2Z \times \dot{\omega}_v \end{aligned}$$

En développant :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Z^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z^2}{\partial x_\alpha} &= Z^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) + 2\rho Z \frac{\partial Z}{\partial t} + 2\rho u_\alpha Z \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \\ &= Z^2 (\dot{\omega}_v) + 2Z \left(\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} \right) - 2Z^2 (\dot{\omega}_v) \\ &= 2Z \left(\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z}{\partial x_\alpha} \right) - Z^2 (\dot{\omega}_v) \end{aligned}$$

Nous avons :

$$\frac{\partial \rho Z^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha Z^2}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z^2}{\partial x_\alpha} \right) - 2\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} + 2Z \dot{\omega}_v - Z^2 \dot{\omega}_v$$

$$\frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{Z}^2}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}_\alpha \widetilde{Z}^2}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}'_\alpha \widetilde{Z}^{i2}}{\partial x_\alpha} - 2 \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}'_\alpha \widetilde{Z}^i \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\widetilde{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}^2}{\partial x_\alpha} \right) - 2\widetilde{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} + 2\widetilde{Z} \widetilde{\omega}_v - \widetilde{Z}^2 \widetilde{\omega}_v$$

A partir de l'équation pour \widetilde{Z} nous obtenons celle pour \widetilde{Z}^2 :

$$\frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}_\alpha \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}'_\alpha \widetilde{Z}^i}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\widetilde{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} \right) + \widetilde{\omega}_v$$

$$2\widetilde{Z} \times \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{Z}}{\partial t} + 2\widetilde{Z} \times \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}_\alpha \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} = -2\widetilde{Z} \times \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}'_\alpha \widetilde{Z}^i}{\partial x_\alpha} + 2\widetilde{Z} \times \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\widetilde{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} \right) + 2\widetilde{Z} \times \widetilde{\omega}_v$$

$$\frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{Z}^2}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}_\alpha \widetilde{Z}^2}{\partial x_\alpha} = -2\widetilde{Z} \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}'_\alpha \widetilde{Z}^i}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\widetilde{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}^2}{\partial x_\alpha} \right) - 2\widetilde{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} + 2\widetilde{Z} \widetilde{\omega}_v - \widetilde{Z}^2 \widetilde{\omega}_v$$

En soustrayant celle pour \widetilde{Z}^2 de celle pour \widetilde{Z} nous obtenons celle pour \widetilde{Z}^{i2} :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{Z}'^2}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}_\alpha \widetilde{Z}'^2}{\partial x_\alpha} &= - \frac{\partial \widetilde{\rho} \widetilde{u}'_\alpha \widetilde{Z}'^2}{\partial x_\alpha} \\
&+ \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\widetilde{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}'^2}{\partial x_\alpha} \right) \\
&- 2 \widetilde{\rho} \widetilde{u}'_\alpha \widetilde{Z}' \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_\alpha} \\
&- 2 \widetilde{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}' \partial \widetilde{Z}'}{\partial x_\alpha \partial x_\alpha} \\
&+ 2 \left(\widetilde{Z} \widetilde{\omega}_v - \widetilde{Z}' \widetilde{\omega}_v \right) \\
&+ \widetilde{Z}^2 \widetilde{\omega}_v - \widetilde{Z}'^2 \widetilde{\omega}_v
\end{aligned}$$

5.5.2 Annexe: Calcul de l'équation de transport de \widetilde{Z}^{I2} à partir de l'équation de la PDF de Z

Cette annexe décrit le calcul des équations pour les fluctuations de Z moyennes à partir des équations de la PDF de Z . Ceci nous permet de vérifier la cohérence de tous les calculs.

L'équation de la PDF de transport de Z s'écrit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \rho | Z = \hat{Z} \rangle P}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho u_\alpha | Z = \hat{Z} \rangle P}{\partial x_\alpha} &= -\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\langle \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) | Z = \hat{Z} \rangle P \right) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\langle (1 - \hat{Z}) \rho \omega_v | Z = \hat{Z} \rangle P \right) \\ &\quad + \langle \rho \omega_v | Z = \hat{Z} \rangle P. \end{aligned}$$

Nous allons intégrer un par un chacun des termes de l'équation de $P(Z)$ en les multipliant préalablement par \hat{Z}^{I2} .

- $\frac{\partial \langle \rho | Z = \hat{Z} \rangle P}{\partial t}$

Soit \hat{Z}^{I2} la fluctuation stochastique de la variable \hat{Z} . Comme elle ne dépend pas du temps il est possible de l'introduire à l'intérieur de la dérivée:

$$\frac{\partial \int \hat{Z}^{I2} \langle \rho | Z = \hat{Z} \rangle P(\hat{Z}) d\hat{Z}}{\partial t} = \frac{\partial \overline{\rho \hat{Z}^{I2}}}{\partial t}. \quad (5.69)$$

- $\frac{\partial \langle \rho u_\alpha | Z = \hat{Z} \rangle P}{\partial x_\alpha}$

Le terme de convection est manipulé de la même façon et fait apparaître le transport de Z^{I2} par les fluctuations de vitesse:

$$\frac{\partial \int \hat{Z}^{I2} \langle \rho u_\alpha | Z = \hat{Z} \rangle P(\hat{Z}) d\hat{Z}}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \overline{\rho u_\alpha \hat{Z}^{I2}}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \overline{\rho u'_\alpha \hat{Z}^{I2}}}{\partial x_\alpha}. \quad (5.70)$$

- $-\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\langle \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) | Z = \hat{Z} \rangle P \right)$

Nous allons utiliser un modèle pour représenter le micro-mélange:

$$-\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\langle \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right) | Z = \hat{Z} \rangle P \right) = -\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(-\frac{\hat{Z}'}{\tau_z} P \right), \quad (5.71)$$

ce modèle correspond au modèle IEM ou LMSE.

Comme la dérivé dépend de \hat{Z} il faut utiliser une intégration par partie:

$$\int \hat{Z}^{I2} \times -\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\frac{\hat{Z}'}{\tau_z} P(\hat{Z}) \right) d\hat{Z} = - \underbrace{\left[-\hat{Z}^{I2} \times \frac{\hat{Z}'}{\tau_z} P(\hat{Z}) \right]}_{=0} + \int -2\hat{Z}^{I2} \frac{\hat{Z}'}{\tau_z} P(\hat{Z}) d\hat{Z} = -2 \frac{\overline{\hat{Z}^{I2}}}{\tau_z}, \quad (5.72)$$

ce qui a fait apparaître la dissipation des fluctuations du scalaire Z .

- $-\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\langle (1 - \hat{Z}) \rho \omega_v \mid Z = \hat{Z} \rangle P \right)$

On intègre aussi par partie:

$$\begin{aligned} & \int \hat{Z}'^2 \times -\frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\langle (1 - \hat{Z}) \rho \omega_v \mid Z = \hat{Z} \rangle P(\hat{Z}) \right) d\hat{Z} = \\ & - [\dots] + \int 2\hat{Z} \langle (1 - \hat{Z}) \rho \omega_v \mid Z = \hat{Z} \rangle P(\hat{Z}) d\hat{Z} = 2\bar{\rho} \left(\widetilde{Z'\omega_v} - Z'\widetilde{Z\omega_v} \right). \end{aligned} \quad (5.73)$$

- $\langle \rho \omega_v \mid Z = \hat{Z} \rangle P$

Le dernier terme s'intègre simplement:

$$\int \hat{Z}'^2 \times \langle \rho \omega_v \mid Z = \hat{Z} \rangle P(\hat{Z}) d\hat{Z} = \bar{\rho} \widetilde{Z'^2 \omega_v} \quad (5.74)$$

5.5.3 Les termes d'évaporation

Il faut quelques calculs pour mettre les termes d'évaporation sous une forme plus pratique. Pour plus de lisibilité on remplace la notion $\tilde{\phi}$ par $\bar{\phi}$ juste pour ce calcul mais c'est toujours une moyenne de Favre:

$$\begin{aligned} & 2 \left(\widetilde{Z'\omega_v} - Z'\widetilde{Z\omega_v} \right) + \widetilde{Z'^2 \omega_v} \\ & = 2 \left(\overline{Z'\omega_v} - \overline{Z'Z\omega_v} \right) + \overline{Z'^2 \omega_v} \\ & = 2 \left(\overline{(\overline{Z} + Z')\omega_v} - \overline{Z\omega_v} \right) - 2\overline{Z'^2 \omega_v} - 2\overline{Z'Z'\omega_v} + \overline{Z'^2 \omega_v} \\ & = 2 \left(\overline{Z\omega_v} - \overline{Z\omega_v} \right) - \overline{Z'^2 \omega_v} - 2\overline{Z'Z'\omega_v} \\ & = 2 \left(\overline{Z\omega_v} - \overline{Z\omega_v} \right) - \overline{(\overline{Z}^2 + 2\overline{Z}Z' - Z'^2)\omega_v} + \overline{Z'^2 \omega_v} \\ & = 2 \left(\overline{Z\omega_v} - \overline{Z\omega_v} \right) + \overline{Z'^2 \omega_v} - \overline{Z'^2 \omega_v} \\ & = 2 \left(\widetilde{Z\omega_v} - \widetilde{Z\omega_v} \right) + \widetilde{Z'^2 \omega_v} - \widetilde{Z'^2 \omega_v}. \end{aligned}$$

On retrouve bien tous les termes de l'équation de $\widetilde{Z'^2}$ avec le terme de dissipation déjà modélisé.

5.5.4 Vérification dans un cas limite de la validité des termes dus à l'évaporation dans l'équation de \widetilde{Z}^2

Considérons une boîte initialement remplie d'air dans laquelle on fait entrer un débit constant \overline{W} d'un mélange d'air et de fuel. La valeur de la variable de mélange initiale dans la boîte est $Z_0 = 0$ et la valeur de Z dans le flux entrant est constante égale à Z_i . On suppose qu'il n'y a pas de dissipation des fluctuations et que la boîte contient un mélangeur qui maintient une richesse homogène dans toute la boîte. Les équations qui décrivent ce mélange sont déduites de celles que l'on utilise pour la vaporisation:

Les équations de $\overline{\rho}$ et Z sont :

$$\frac{d\overline{\rho}}{dt} = \overline{W} \quad (5.75)$$

et

$$\frac{d\overline{\rho}\widetilde{Z}}{dt} = Z_i\overline{W}. \quad (5.76)$$

L'équation pour la variance de Z pour un milieu homogène sans dissipation des fluctuations est:

$$\frac{d\overline{\rho}\widetilde{Z}^2}{dt} = 2 Z_i (\overline{Z}\overline{W} - \widetilde{Z}\overline{W}) + \widetilde{Z}^2\overline{W} - \overline{Z^2}\overline{W}. \quad (5.77)$$

De plus on connaît la PDF de Z pour un tel milieu:

$$P(Z) = a\delta(Z) + b\delta(Z - Z_i) \quad (5.78)$$

Les trois premiers moments de cette PDF nous donnent les relations:

$$a + b = 1, \quad (5.79)$$

$$bZ_i = \widetilde{Z}, \quad (5.80)$$

$$\widetilde{Z}^2 = \widetilde{Z}(Z_i - \widetilde{Z}). \quad (5.81)$$

On peut dériver directement le produit $\overline{\rho}\widetilde{Z}^2$, puisque l'on connaît la valeur de \widetilde{Z}^2 , pour obtenir l'équation exacte:

$$\frac{d\overline{\rho}\widetilde{Z}^2}{dt} = \frac{d\overline{\rho}\widetilde{Z}(Z_i - \widetilde{Z})}{dt} \quad (5.82)$$

$$\frac{d\overline{\rho}\widetilde{Z}(Z_i - \widetilde{Z})}{dt} = Z_i \frac{d\overline{\rho}\widetilde{Z}}{dt} - \frac{d\overline{\rho}\widetilde{Z}^2}{dt} \quad (5.83)$$

$$= Z_i^2\overline{W} - \widetilde{Z}^2 \frac{d\overline{\rho}}{dt} - 2\overline{\rho}\widetilde{Z} \frac{d\widetilde{Z}}{dt} \quad (5.84)$$

$$= Z_i^2\overline{W} - \widetilde{Z}^2\overline{W} - 2\widetilde{Z} \left(\overline{\rho} \frac{d\widetilde{Z}}{dt} \right) \quad (5.85)$$

$$= Z_i^2\overline{W} - \widetilde{Z}^2\overline{W} - 2\widetilde{Z} \left(\frac{d\overline{\rho}\widetilde{Z}}{dt} - \widetilde{Z} \frac{d\overline{\rho}}{dt} \right) \quad (5.86)$$

$$= Z_i^2 \overline{W} - \tilde{Z}^2 \overline{W} - 2\tilde{Z} (Z_i \overline{W} - \tilde{Z} \overline{W}) \quad (5.87)$$

$$= Z_i^2 \overline{W} - 2Z_i \tilde{Z} \overline{W} + \tilde{Z}^2 \overline{W} \quad (5.88)$$

Finalement l'équation exacte de la variance est:

$$\frac{d\overline{\rho Z'^2}}{dt} = (Z_i - \tilde{Z})^2 \overline{W} \quad (5.89)$$

Nous voulons vérifier dans ce cas où l'on peut tout calculer que les fermetures utilisées pour l'équation de $\widetilde{Z'^2}$ sont exactes.

En remarquant que là où il y a production de masse $Z = Z_i$, on a directement la fermeture des corrélations:

$$- \overline{Z\overline{W}} = Z_i \overline{W};$$

$$- \overline{Z^2 \overline{W}} = Z_i^2 \overline{W};$$

donc l'équation modélisée devient:

$$\frac{d\overline{\rho Z'^2}}{dt} = 2Z_i (Z_i - \tilde{Z}) \overline{W} + (\tilde{Z}^2 - Z_i^2) \overline{W} \quad (5.90)$$

$$= (Z_i - \tilde{Z})^2 \overline{W}. \quad (5.91)$$

On retrouve bien l'équation exacte de $\widetilde{Z'^2}$, par contre si on avait supposé l'indépendance statistique de Z et W on aurait les fermetures suivantes:

$$- \overline{Z\overline{W}} = \tilde{Z} \overline{W};$$

$$- \overline{Z^2 \overline{W}} = \tilde{Z}^2 \overline{W};$$

qui donnent:

$$\frac{d\overline{\rho Z'^2}}{dt} = 2Z_i (\tilde{Z} - \tilde{Z}) \overline{W} + (\tilde{Z}^2 - \tilde{Z}^2) \overline{W} \quad (5.92)$$

$$= -\widetilde{Z'^2} \overline{W}. \quad (5.93)$$

On ne retrouve pas le résultat exact et de plus on trouve un terme de destruction alors que dans l'équation exacte c'est un terme de production.

5.5.5 Annexe pour déterminer $P(Z)$ en fonction de $P(t)$ la probabilité de temps de séjour

Dans le cas général la PDF il faut considérer la PDF jointe de Z , du temps de séjour t , du temps de mélange τ_Z et des valeurs initiales de Z : Z_i .

On connaît la PDF des valeurs initiales, $P(Z_i)$:

$$P(Z_i) = \frac{\bar{Z}_i - \tilde{Z}}{Z_i} \delta(Z_i) + \frac{\tilde{Z}}{Z_i} \delta(Z_i - \bar{Z}_i). \quad (5.94)$$

On connaît la PDF des temps de séjour, $P(t)$:

$$P(t) = \frac{\exp\left(-\frac{t}{t_s}\right)}{t_s}. \quad (5.95)$$

On suppose que la PDF des temps de mélange est réduite à, $P(\tau_Z)$:

$$P(\tau_Z) = \delta(\tau_Z - C\tau_t). \quad (5.96)$$

Et finalement on connaît une relation qui lie Z à t , τ_Z et Z_i :

$$Z(t) = \tilde{Z} + (Z_i - \tilde{Z}) e^{-\frac{t}{\tau_Z}}. \quad (5.97)$$

Tout d'abord en remarquant que Z_i est indépendant des autres variables, on a:

$$\begin{aligned} P(Z) &= \int_{Z_i} \int_t \int_{\tau_Z} P(Z, \tau_Z, Z_i, t) dZ d\tau_Z dZ_i dt, \\ &= \int_{Z_i} \int_t \int_{\tau_Z} P(Z, \tau_Z, t)|_{Z_i} P(Z_i) d\tau_Z dZ_i dt \\ &= \int_{Z_i} P(Z_i) \int_t \int_{\tau_Z} P(Z, \tau_Z, t)|_{Z_i} d\tau_Z dt dZ_i \\ &= \int_{Z_i} P(Z_i) P(Z)|_{Z_i} dZ_i \\ &= \frac{\bar{Z}_i - \tilde{Z}}{Z_i} P(Z)|_{Z_i=0} + \frac{\tilde{Z}}{Z_i} P(Z)|_{Z_i=\bar{Z}_i} \end{aligned} \quad (5.98)$$

On utilise ensuite la relation:

$$P(Z)|_{Z_i} \left| \frac{dZ(t)}{dt} \right| = P(t). \quad (5.99)$$

avec $\left| \frac{dZ(t)}{dt} \right| = \frac{|Z_i - \tilde{Z}|}{\tau_Z} \exp\left(-\frac{t}{\tau_Z}\right)$, il vient:

$$P(Z)|_{Z_i} = \frac{\tau_Z}{|Z_i - \tilde{Z}|} \exp\left(+\frac{t}{\tau_Z}\right) \frac{\exp\left(-\frac{t}{t_s}\right)}{t_s} = \frac{\tau_Z}{t_s |Z_i - \tilde{Z}|} \exp\left(t \left(\frac{1}{\tau_Z} - \frac{1}{t_s}\right)\right). \quad (5.100)$$

De la relation qui lie Z aux autres variables on a:

$$t = -\tau_Z * \ln \left(\frac{\tilde{Z} - Z}{\tilde{Z} - Z_i} \right) \quad (5.101)$$

et Z doit être compris entre Z_i et \tilde{Z} .

En introduisant cette valeur de t dans l'équation pour la PDF de Z il vient:

$$P(Z)|_{Z_i} = \begin{cases} \frac{\tau_Z}{t_s |Z_i - \tilde{Z}|} \left(\frac{\tilde{Z} - Z}{\tilde{Z} - Z_i} \right)^{\frac{\tau_Z}{t_s} - 1} & \text{si } Z \text{ est compris entre } Z_i \text{ et } \tilde{Z}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Finalement on applique ce résultat à l'équation (5.100) et cela donne la formulation de la PDF de Z :

$$P(Z) = \begin{cases} \left(1 - \frac{\tilde{Z}}{Z_i}\right) r \frac{(\tilde{Z} - Z)^{r-1}}{\tilde{Z}^r} & \text{si } Z < \tilde{Z}, \\ \left(\frac{\tilde{Z}}{Z_i}\right) r \frac{(Z - \tilde{Z})^{r-1}}{(Z_i - \tilde{Z})^r} & \text{si } \tilde{Z} < Z < Z_i, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

où $r = \frac{\tau_Z}{t_s}$.

Chapitre 6

Implémentation et résultats

Les équations qui décrivent un milieu turbulent, réactif et diphasique ont été écrites dans les chapitres précédents. Des méthodes et des modèles ont été proposés pour les fermer qui devraient permettre de prendre en compte les principales caractéristiques de la combustion en milieu diphasique. La validation de cet ensemble doit se faire en comparant les résultats des modèles aux expériences.

6.1 Implémentation de la méthode

6.1.1 Le code existant

Pour passer de la modélisation à la validation nous devons commencer par implémenter les méthodes proposées dans un code de calcul. Le nombre d'équations et de paramètres à prendre en compte nous a contraint à prendre pour base un code déjà existant. Nous avons choisi le code de calcul KIVAGSM, qui est lui-même basé sur le code KIVAIL de Los Alamos [3] et qui contient de plus, des améliorations développées par RENAULT, PEUGEOT et l'Institut Français du Pétrole. Le code de calcul KIVAGSM est un code de calcul 3-D de mécanique des fluides pour des milieux réactifs diphasiques turbulents.

La méthode SEL qui décrit le spray par un ensemble de particules stochastiques y est déjà implémentée. L'injection du liquide est représentée par l'injection aléatoire de particules qui contiennent toutes la même masse de liquide. Chaque particule représente un ensemble de gouttes qui ont toutes le même rayon et la même température. Par conséquent si le rayon est grand la particule représente un nombre de gouttes petit et même peut représenter une fraction d'une grosse goutte. Si au contraire le rayon est petit la particule représente un nombre élevé de petites gouttes. De cette manière, c'est la masse totale de liquide par unité de volume qui est discrétisée. Si chaque particule représentait un nombre identique de gouttes, celles qui auraient des gouttes de rayons petits contiendraient peu de masse et celles qui auraient des gouttes de rayons grands contiendraient beaucoup de masse. Dans ce cas c'est le nombre de gouttes par unité de volume qui serait discrétisé. La première description basée sur la masse permet de bien suivre la masse moyenne de liquide, par contre elle n'est pas efficace pour déterminer où sont les petites gouttes. En effet celles-ci ne contenant que peu de masse seront rassemblées dans un petit nombre de particules. La dispersion de ces petites gouttes peut alors poser des problèmes. Cette méthode est donc utile pour les cas où les petites gouttes ne jouent pas de très grands rôles.

La contribution de ces gouttes, par exemple pour le taux de vaporisation se fait dans la cellule où se trouve la particule. Cela revient à dire que des gouttes, représentées par la particule, sont uniformément réparties dans la maille de calcul où est la particule. Le volume du liquide est négligé, donc les gouttes se comportent comme des points sources, sans volume. Cette hypothèse n'est valable que dans le cas de spray dilué, où la somme du volume de liquide contenu dans une maille de calcul est négligeable par rapport au volume de la maille.

Dans KIVA2GSM la combustion n'est traitée, pour le cas diphasique, que par le modèle de Magnussen, et c'est justement ce défaut que la méthode proposée doit corriger.

6.1.2 Le principe de l'amélioration de KIVAGSM

La méthode proposée demande d'abord d'ajouter deux équations de transport supplémentaires.

1. L'équation pour $\widetilde{Z'^2}$:

Cette équation pour la variance des fluctuations de Z contient un terme de production par les gradients moyens et les termes de vaporisation. Le calcul du gradient de la variable \widetilde{Z} dans toutes les directions avec le traitement spécial des conditions aux limites a été rajouté, basé sur une méthode de différences finies. Ce point pourrait être amélioré. Les termes dus à l'évaporation que multiplie Z_S ou Z_S^2 sont calculés dans la subroutine d'évaporation, conformément aux résultats de l'approche théorique développée au [5.3.4].

2. L'équation pour $\widetilde{Z\overline{Z}_i}$:

Le terme de cette équation dû à la vaporisation est le même que pour l'équation de $\widetilde{Z'^2}$ et n'a donc pas besoin d'être recalculé.

Les évolutions de la fraction massique moyenne de chaque espèce et de l'énergie interne moyenne sont ensuite calculées à partir des termes sources de combustion, calculés par le modèle. L'intégration des équations tridimensionnelles dans le code KIVA est basée sur une méthode de volumes finis avec des pas fractionnaires pour l'intégration temporelle. La première phase de l'intégration consiste en une étape Lagrangienne qui contient différents sous-pas. Dans le premier sous-pas les termes de convection et de diffusion sont absents. C'est dans ce sous-pas que se situe le modèle de combustion où l'on prend en compte les termes sources de toutes les équations à l'exception de celles pour la vitesse et celles pour le modèle de turbulence, qui sont résolues après.

Il y a trois versions du modèle, qui utilisent toutes la forme de la PDF valide dans le cas du réacteur homogène avec le modèle de micro-mélange IEM. Ceci permet d'intégrer analytiquement les équations sur cette PDF:

1. Le premier modèle suppose que la chimie est infiniment rapide. Le mélange y est représenté par un seul temps turbulent moyen.
2. Le deuxième modèle suppose que la chimie est infiniment brusque. Le mélange y est représenté par un seul temps turbulent moyen.
3. Le troisième modèle suppose que la chimie est infiniment brusque. Le mélange y est représenté par la PDF de temps de mélange proposé par Borghi et *al* [11].

Les deux premiers modèles sont analytiques ainsi le temps de calcul supplémentaire dû à la chimie est négligeable. L'intégration de la fraction massique moyenne et du taux de réaction moyen, pondérée par la PDF de temps de mélange, se fait avec une méthode des trapèzes pour le troisième modèle.

Afin de trouver l'emplacement des sauts dans l'hypothèse d'une chimie infiniment brusque, il faut calculer un taux de réaction chimique. Nous avons utilisé le modèle d'Arrhenius qui donne le taux de réaction en fonction des concentrations des réactifs et de la température avec l'hypothèse d'une réaction unique, par exemple pour le combustible F :

$$\frac{d[F]}{dt} = \omega_c(F) = A [F]^a [O_2]^b e^{-\frac{E_a}{RT}}, \quad (6.1)$$

où A est la constante pré-exponentielle, a et b sont des constantes et E_a est l'énergie d'activation. Nous avons utilisé les valeurs suivantes pour un taux de réaction en $\text{moles.cm}^{-3}\text{s}^{-1}$:

Combustible	A	a	b	E_a kJ/mole
Méthanol	3.2^{12}	0.25	1.5	30.0
Dodécane	3.0^{11}	0.25	1.5	30.0

Le code KIVA ne contient ni préprocesseur ni postprocesseur. Le maillage des différents cas a donc été fait séparément par un petit programme. De même les sorties graphiques de toutes les variables ont été traitées par une subroutine supplémentaire dans KIVA. Les logiciels de graphisme utilisés sont GNU PLOT, MATLAB et GMV.

6.2 Cas d'une flamme jet diphasique turbulente de méthanol

6.2.1 Description de l'expérience

Pour éviter de devoir traiter théoriquement le problème de l'atomisation nous avons cherché des expériences de combustion diphasique où la distribution de tailles de gouttes après l'atomisation ait été mesurée. Nous utiliserons les résultats de l'expérience effectuée au CORIA par A.Cessou, D.Stepowski [18] et par P.J.Goix [49]. Cette expérience a l'avantage de nous donner des mesures de distribution de gouttes au fur et à mesure que l'on s'élève dans la flamme, qui peuvent servir comme conditions aux limites. La combustion est étudiée par des mesures de OH, des photos de la flamme et la hauteur d'accrochage de la flamme. Quelques mesures nous manquent cependant au point de vue quantitatif, comme la fraction volumique de liquide ou les températures.

La configuration de l'expérience est représentée sur la Figure: 6.1. Il s'agit d'un jet de méthanol liquide destabilisé par un écoulement annulaire d'air. Le jet est vertical et dirigé vers le haut. La flamme est stationnaire en moyenne. L'air nécessaire à la combustion est fourni par le jet d'air annulaire qui sert à l'atomisation et par l'air extérieur provenant des ouvertures latérales faites dans la boîte qui entoure la flamme. L'injecteur est représenté Figure: 6.2. L'atomisation est assurée par la forte différence de vitesse qu'il y a entre le jet liquide et l'air qui l'entoure. Le jet de méthanol liquide subit dès sa sortie sur son bord extérieur un cisaillement important dû à l'écoulement concentrique qui l'entoure ('co-flow'). Ceci a pour effet de briser le jet en spray et de l'accélérer. Le spray est ensuite allumé et reste stationnaire en moyenne. Des ouvertures faites sur le côté de la boîte alimentent la combustion en air frais. Les deux cas expérimentaux de référence retenus sont, un cas où la différence de vitesse entre le jet liquide et le 'co-flow' est faible (Low Delta U :LDU) et, un cas où elle est forte (High

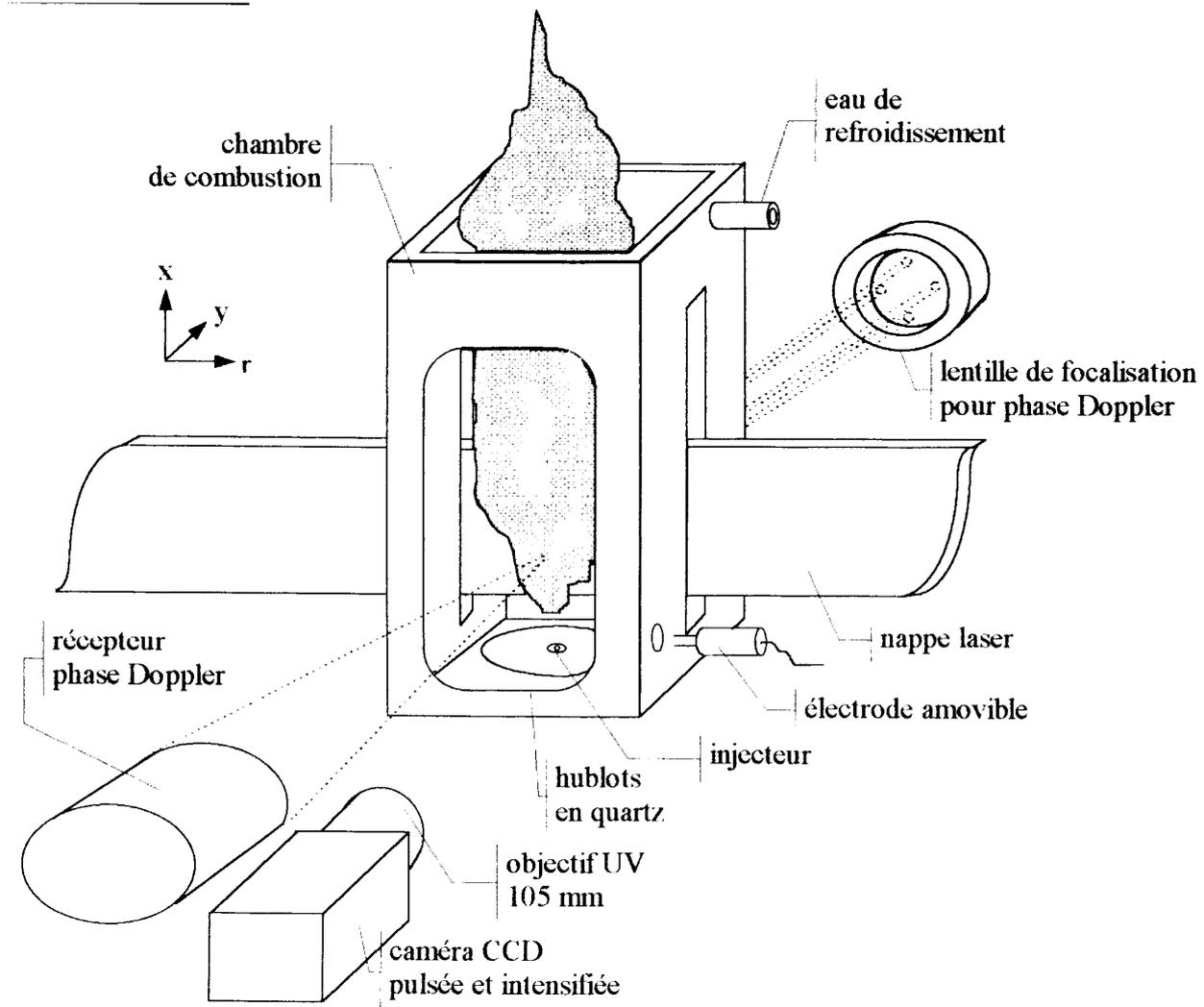


FIG. 6.1 – Vue d'ensemble de la chambre de combustion [49]

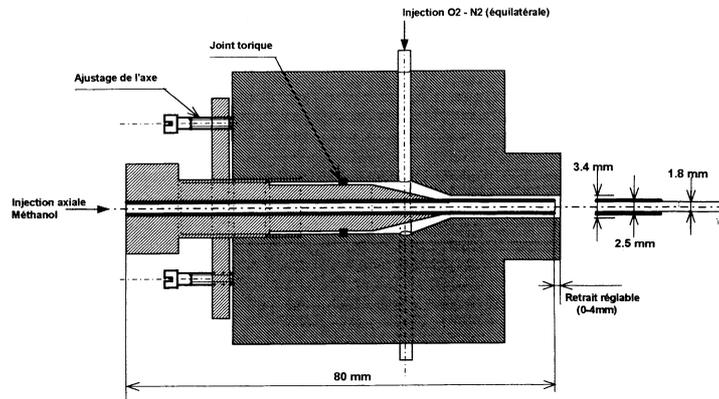


FIG. 6.2 – Coupe longitudinale de l'injecteur [49]

Delta U : HDU). Les débits associés sont :

	LDU	HDU
débit de méthanol	0.70 g/s	0.89 g/s
vitesse du liquide	0.28 m/s	0.36 m/s
débit d'air	0.35 g/s	0.55g/s
vitesse de l'air	70 m/s	110 m/s

Ces deux cas ont été choisis car ils représentent deux types de flammes différentes. Des mesures de concentration du radical OH ont été effectuées par fluorescence induite par laser (L.I.F.) bidimensionnelle. Elles permettent de voir les structures réactives instantanées, Figure: 6.3. Nous ne pouvons pas comparer ces mesures directement puisque nous calculons des valeurs moyennes. Elles ne donnent qu'une indication, d'autant que celles représentées ici, ne sont pas forcément les plus souvent rencontrées, mais ont été sélectionnées pour représenter la différence de structure entre le cas LDU et HDU. Le radical OH sert de marqueur de la zone de réaction. Il permet de voir que dans le cas LDU celle-ci est double: une au centre du jet et une autre à l'extérieur du jet. Dans le cas HDU la zone de réaction, centrale est beaucoup moins visible; on peut interpréter cela comme le fait qu'elle est beaucoup plus perturbée, déchiquetée et finalement épaissie par la turbulence plus forte qui y régné (à cause du fort *DeltaU*).

Les distributions de tailles de gouttes ont été mesurées par interférométrie de phase doppler à deux composantes [50]. Des mesures de vitesse de gouttes sont faites le long du profil dans la direction radiale à trois hauteurs différentes dans la flamme. Les mesures les plus proches de l'injecteur sont situées à 15 millimètres en aval de celui-ci. Avant cette hauteur le brouillard de gouttelettes est trop dense et gêne la mesure.

6.2.2 Condition de la simulation numérique

Afin d'obtenir les bonnes tailles de gouttes, nous avons injecté le méthanol suivant la distribution de tailles de gouttes mesurée à 15 millimètres. Les types de distribution de rayon possibles dans KIVA ne correspondent pas exactement aux mesures. Nous avons donc modifié

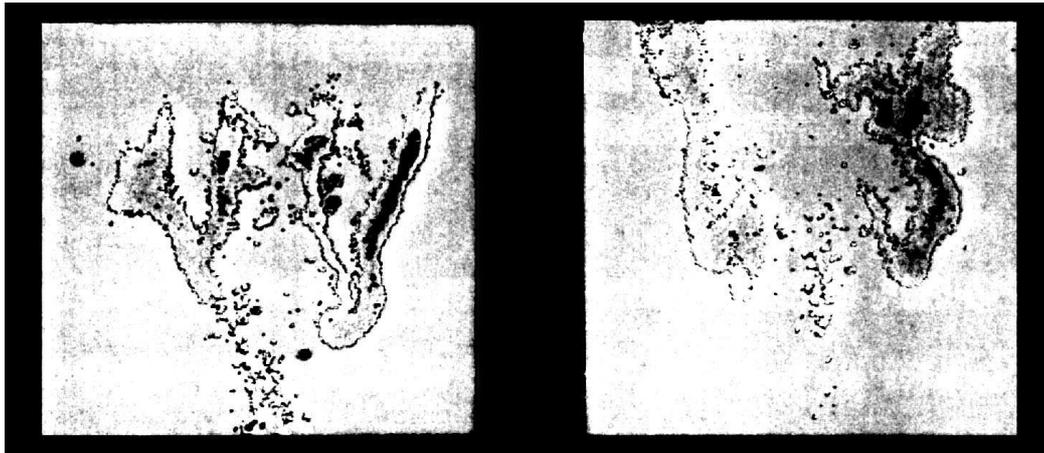


FIG. 6.3 – Mesures du radical OH , instantanées, par L.I.F. dans le cas LDU (gauche) et HDU (droite)

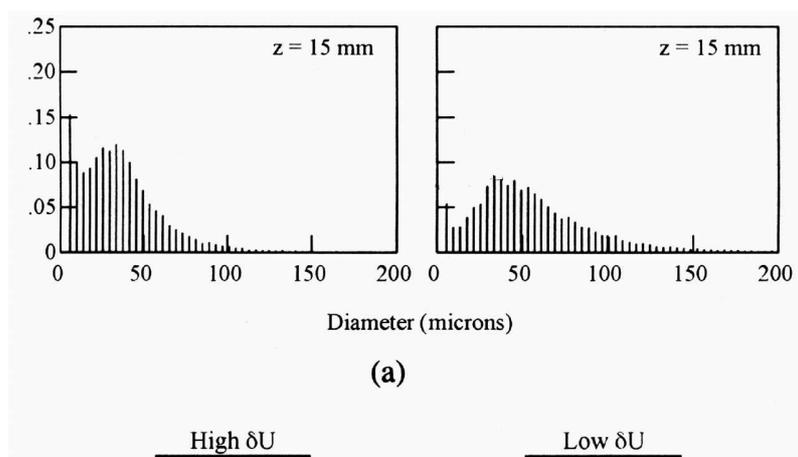


FIG. 6.4 – Mesures de la distribution des diamètres des gouttes à 15 mm au dessus de l'injecteur et à 3 mm de l'axe du jet. A gauche dans le cas HDU et à droite dans le cas LDU, d'après [50]

le système d'injection afin qu'il puisse suivre une distribution de tailles de gouttes rentrée en données. Les distributions utilisées lors de l'injection sont celles mesurées dans chacun des cas à 3 millimètres de l'axe du jet dans la direction radiale et à une altitude de 15 millimètres au-dessus de l'injecteur, Figure: 6.4. De plus le diamètre d'entrée du méthanol n'est pas négligeable devant la taille du maillage. Donc, il n'est plus possible de considérer que l'injection se fait en un point. L'injection a été modifiée pour pouvoir injecter sur une surface. Le combustible méthanol a été rajouté à la liste des carburants possibles dans KIVA.

La géométrie de la chambre de combustion est assez compliquée. Nous ferons quand même l'hypothèse que l'écoulement est axisymétrique bien que les entrées d'air sur les côtés et la forme rectangulaire des parois ne vérifient pas parfaitement cette hypothèse. Les parois de la boîte de confinement se situent au plus près à 4 centimètres de l'axe (les dimensions de la boîte sont $80 \times 80 \times 265 \text{ mm}$) alors que le domaine de calcul ne s'étend qu'à 2.5 centimètres de l'axe, ce qui devrait limiter l'effet des conditions limites non axisymétrique dues aux parois de la boîte.

Les conditions aux limites posent problème pour le début de l'atomisation. Près de l'injecteur nous sommes dans la partie d'atomisation primaire ce qui est en désaccord avec les hypothèses de KIVA car le liquide n'est pas sous forme de gouttes sphériques et sa fraction volumique est importante. La simulation de cette partie avec les modèles d'atomisation inclus dans KIVA n'est pas très adaptée. Deux solutions s'offrent à nous :

- Soit nous commençons le calcul à 15 mm de l'injecteur il faut alors "deviner" le profil de vitesse des gaz entrants, les profils des données de turbulence, les profils de concentrations...
- Soit nous commençons le calcul dès le début de l'injection avec une distribution de taille de gouttes établie par les mesures à 15mm, en interdisant la cassure et la coalescence des gouttes dans le modèle d'atomisation. On donne la vraie vitesse initiale du jet et en le laissant s'accélérer grâce au flux d'air périphérique. De cette manière bien que l'on n'ait pas de bon modèle d'atomisation, pour l'instant, dans KIVA, on obtiendra les bonnes tailles de gouttes à 15 millimètres. Mais ce n'est pas forcément la réalité de l'atomisation.

La première solution semble trop incertaine car il y a trop de paramètres inconnus. De plus comme le point d'accrochage de la combustion se situe en dessous de 15 millimètres pour le cas LDU Figure: 6.5, il faudrait aussi estimer le pourcentage de gaz brûlé. Nous avons d'abord opté pour la seconde solution bien qu'elle ne soit pas non plus satisfaisante.

Les différents calculs effectués ont montré qu'aucune des méthodes que nous avons à notre disposition n'était vraiment satisfaisante. Le tout début du jet, en dessous de 5 millimètres ne contient pratiquement que du liquide. A cet endroit il faudrait résoudre les équations d'un liquide pur. Dans KIVA ce corps liquide est toujours considéré comme un ensemble de gouttelettes de volumes négligeables, ce qui veut dire qu'il contient des gaz, et notamment de l'air apporté par le 'cow-flow'. Ce qui permet aux gouttes de s'évaporer et même à la vapeur de fuel de se mélanger et de commencer à brûler alors qu'il ne devrait y avoir que du liquide. Ceci est totalement irréaliste il faudrait prendre en compte de façon claire la fraction volumique de liquide, comme l'ont fait Vallet et *al* [100]. Ceci n'a pu être effectuée durant cette thèse.

Les résultats de simulation de cette expérience ne pourront dès lors qu'être qualitatifs.

La fin du coeur liquide se situe environ à 5 millimètres au-dessus de l'injecteur. Dans le coeur liquide, il ne peut y avoir ni évaporation, ni combustion. Un autre problème concerne

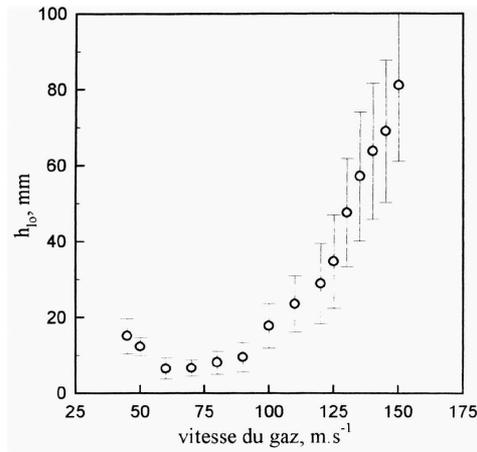


FIG. 6.5 – Mesures de la hauteur de suspension de la flamme avec son écart type dans un cas similaire à ceux étudiés (ici le débit de fuel liquide est de $1g.s^{-1}$ au lieu de $0.7g.s^{-1}$ et $0.89g.s^{-1}$ dans les cas respectivement LDU et HDU), d'après [18]. La hauteur de suspension est fonction de la vitesse du flux d'air périphérique. On voit que pour une vitesse de $70m.s^{-1}$, pour le cas LDU, la hauteur de suspension de la flamme est inférieure à la hauteur 15 millimètres, qui correspond à la mesure des caractéristiques du spray la plus proche de l'injecteur.

l'angle d'ouverture du jet de gouttes et d'air. Celui-ci devrait être calculé par une bonne modélisation de l'interaction entre le liquide et l'air qui au moment de l'atomisation distribue les trajectoires des gouttes dans un cône. Ceci n'est pas un problème résolu et, en général, la modélisation de ce phénomène se fait en prescrivant des vitesses de gouttes qui sont distribuées dans un cône, d'angle fixé, au moment de leur injection. Cette méthode n'a quasiment pas d'effet ici puisque la quantité de mouvement initiale des gouttes au moment de l'injection est négligeable devant celle de l'air atomisant. Ainsi, quel que soit l'angle d'injection des gouttes, elles prennent rapidement la direction du jet d'air.

Afin de représenter ces phénomènes, nous avons utilisé différentes solutions, les résultats présentés ici utilisent l'un des deux types de conditions d'entrée représentées Figure: 6.6. Pour les conditions d'entrées de type 1, représentées à gauche, les gouttes sont injectées dès le début. Pour tenir compte de l'existence d'un coeur liquide l'évaporation ne commence que pour des gouttes se situant au dessus de 5 millimètres. Pour obtenir une ouverture convenable de la flamme, le jet d'air est penché vers l'extérieur avec un angle de 10 degrés avec la verticale. Les résultats dépendent fortement de la hauteur à laquelle la vaporisation est permise, et de l'angle du jet d'air. De plus comme représenté sur le schéma, une recirculation des gaz se forme à l'endroit où il devrait y avoir le coeur liquide. Ceci n'est pas réaliste car cela induit un mélange supplémentaire qui ne peut pas exister dans la réalité. Pour les conditions d'entrées de types 2, représentées à droite, on tient compte explicitement du coeur liquide. Celui-ci est représenté par une paroi solide conique. Le long de cette paroi les gouttes sont injectées avec la vitesse initiale réelle du jet liquide, $0.28m.s^{-1}$. En fait, même dans le coeur liquide la vitesse du liquide et donc des gouttes augmente. Cependant, nous supposons que cette vitesse augmente peu et reste toujours négligeable devant la vitesse du flux d'air périphérique. Dans ces conditions, cette vitesse en fin de coeur liquide ne devrait pas être un paramètre trop important. Pour tenir compte de la densité du spray, on a volontairement limité l'évaporation

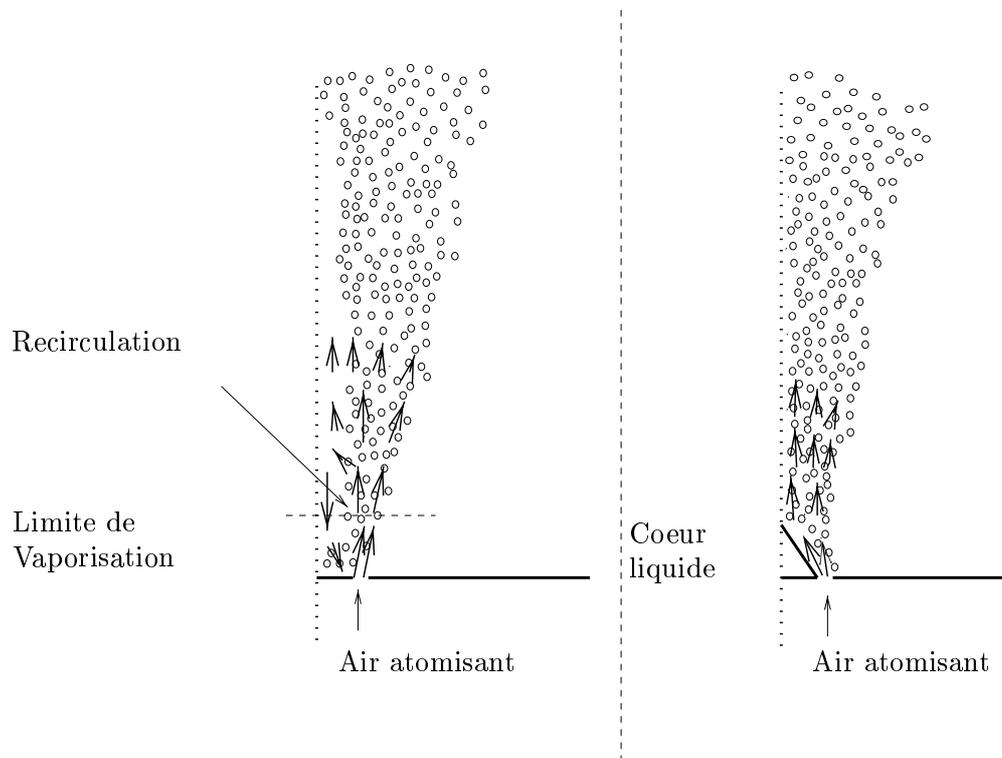


FIG. 6.6 – Schéma d'injection utilisées dans les calculs

au cas où la fraction volumique de liquide est inférieure 0.0015, ce qui correspond à un espace intergoutte moyen d'environ cinq diamètres. Le jet d'air est injecté le long du coeur liquide pour pouvoir interagir avec les gouttes. Il n'est alors plus possible de prescrire l'angle de la flamme en modifiant l'inclinaison du jet d'air vers l'extérieur.

6.2.3 Résultats

Le maillage utilisé est représenté Figure: 6.7. Il est constitué de $24 \times 44 = 1056$ mailles. Il

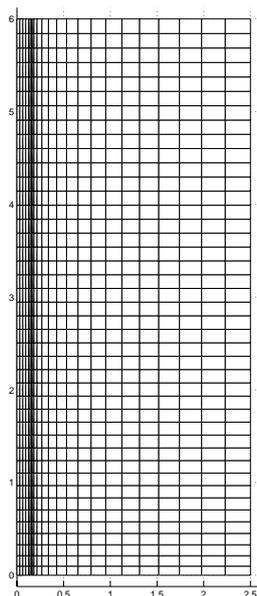


FIG. 6.7 – *Maillage axisymétrique utilisé*

il y a une seule maille dans le sens de l'épaisseur, comme nous sommes dans une configuration axisymétrique. La prise en compte du 'co-flow' conduit à raffiner le maillage à sa sortie. En effet, la différence de vitesse est très forte de l'ordre de 70 à 110 m/s suivant le cas, ce qui crée un cisaillement très fort et pour bien le simuler, il faut des mailles assez fines. De plus, dans KIVA le pas de temps est variable, il est estimé partout dans la zone de calcul en fonction du taux de réaction, du taux d'évaporation, du taux de cisaillement et de son taux d'accroissement, ensuite le code utilise le plus petit pas de temps calculé. Dans cette expérience, c'est celui calculé à partir du taux de cisaillement à la sortie du 'co-flow' qui est le plus petit. Ce temps est pour les cas LDU et HDU respectivement de l'ordre de $3 \cdot 10^{-6}$ et $2 \cdot 10^{-6}$ secondes. Dans le cas des conditions d'entrées de type 2, une paroi est rajoutée. Celle-ci s'étend du début du jet d'air atomisant pour la hauteur zéro à l'axe pour une hauteur de 4 millimètres.

L'allumage s'effectue, soit de façon "Diesel", c'est-à-dire que le spray est supposé arriver dans une atmosphère chaude: 800K, soit en imposant une température du jet d'air atomisant élevée (1500 degrés Kelvin), durant les premières 10 millisecondes. La durée totale du calcul est de 50 millisecondes, la flamme s'établit durant les premières 20 millisecondes et les résultats moyens sont obtenus en moyennant les champs scalaires durant les 30 dernières millisecondes pour gommer les fluctuations dues à la représentation stochastique des gouttes.

Les résultats présentés ici sont obtenus avec une chimie supposée infiniment brusque et un seul temps de mélange moyen supposé proportionnel au temps de mélange turbulent.

La Figure: 6.8 représente une comparaison d'une photographie de la flamme (à gauche) et du champ de température moyen calculé par KIVA (à droite) avec les conditions d'entrées de types 1. Dans la partie expérimentale, à gauche, il y a deux types de visualisation. La lumière bleue est directement émise par la flamme, elle correspond à une intégration de toute la lumière émise dans le plan perpendiculaire à l'image et dans le temps. La lumière verte représente une coupe instantanée du champ de liquide dans le plan central. Le champ de température calculée correspond à une flamme de forme semblable à celle de l'expérience.

La Figure: 6.9 montre le même type de comparaison dans un cas où la différence de vitesse est forte. La forme de la flamme est qualitativement bien représentée par le modèle. L'élévation de la flamme observée de façon expérimentale est à peu près reproduite par le modèle.

Cependant, il n'est pas possible de considérer ces comparaisons comme des cas test pour le modèle en raison des incertitudes liés au conditions d'entrées. Dans la suite, il nous a semblé préférable d'utiliser les conditions d'entrées de type 2 qui nous semblent les plus réalistes, même si elles ne donnent pas des résultats parfaits, et de faire varier certains paramètres du modèle.

La Figure: 6.10 et la Figure: 6.11 montrent respectivement les champs de température moyen et de taux de réaction moyen dans le cas LDU. On voit que l'ouverture de la flamme est sous estimée, ce qui montre que sans imposer un angle du jet, les modèles de turbulence tel qu'ils sont dans KIVA ne reproduisent pas bien dans ce cas l'épanouissement de la flamme. On voit que la température y est assez faible. Dans ce cas le temps de mélange qui est utilisé dans le modèle IEM est modélisé par: $\tau_Z = 0.2 \frac{k}{\epsilon}$. La Figure: 6.12 et la Figure: 6.13 montrent respectivement les champs de température moyen et de taux de réaction moyen obtenus en utilisant un temps de mélange modélisé par: $\tau_Z = 0.1 \frac{k}{\epsilon}$. L'augmentation de la température moyenne se traduit par un taux de réaction plus important. Comme on a augmenté la dissipation entre les deux cas, cela signifie que la meilleure combustion est due à un meilleur mélange aux petites échelles. La Figure: 6.14 représente le taux de ségrégation moyen obtenu dans les deux cas. Cela confirme bien que les températures plus élevées obtenues dans le deuxième cas (qui correspond au taux de ségrégation représenté à gauche), sont le résultat d'un meilleur mélange. De plus le niveau très élevé des taux de ségrégation est une caractéristique des flammes diphasiques, qui rend très important la modélisation du temps de mélange. Il est possible que la valeur de la constante utilisée dans le cas diphasique soit différentes de celle utilisée dans le cas gazeux, il faudrait pouvoir mesurer les niveaux de températures pour la fixer.

Il est possible de voir sur les Figure: 6.11 et Figure: 6.13 deux zones, pour le taux de réaction: une première "extérieure" que l'on rencontre dans les flammes de diffusions gazeuses et une autre proche du centre qui est caractéristique des flammes diphasiques. La Figure: 6.15 permet de comprendre d'où viennent ces zones de réaction à l'intérieur du jet. Au début, près du centre il existe de l'oxygène qui ne peut pas brûler car le combustible nécessaire est encore sous forme liquide. La combustion se produit au fur et à mesure que la vaporisation libère de la vapeur de fuel. Finalement, il reste une certaine quantité d'oxygène qui ne réagit pas même si il y a assez de combustible gazeux. Ceci est dû aux fortes inhomogénéités de richesse qui traduisent la présence de poches riches autour des gouttes.

Afin de tester la modélisation, nous nous sommes tournés vers une autre expérience où les modèles d'atomisation et d'injection ont été validés et ajustés pour représenter correctement la

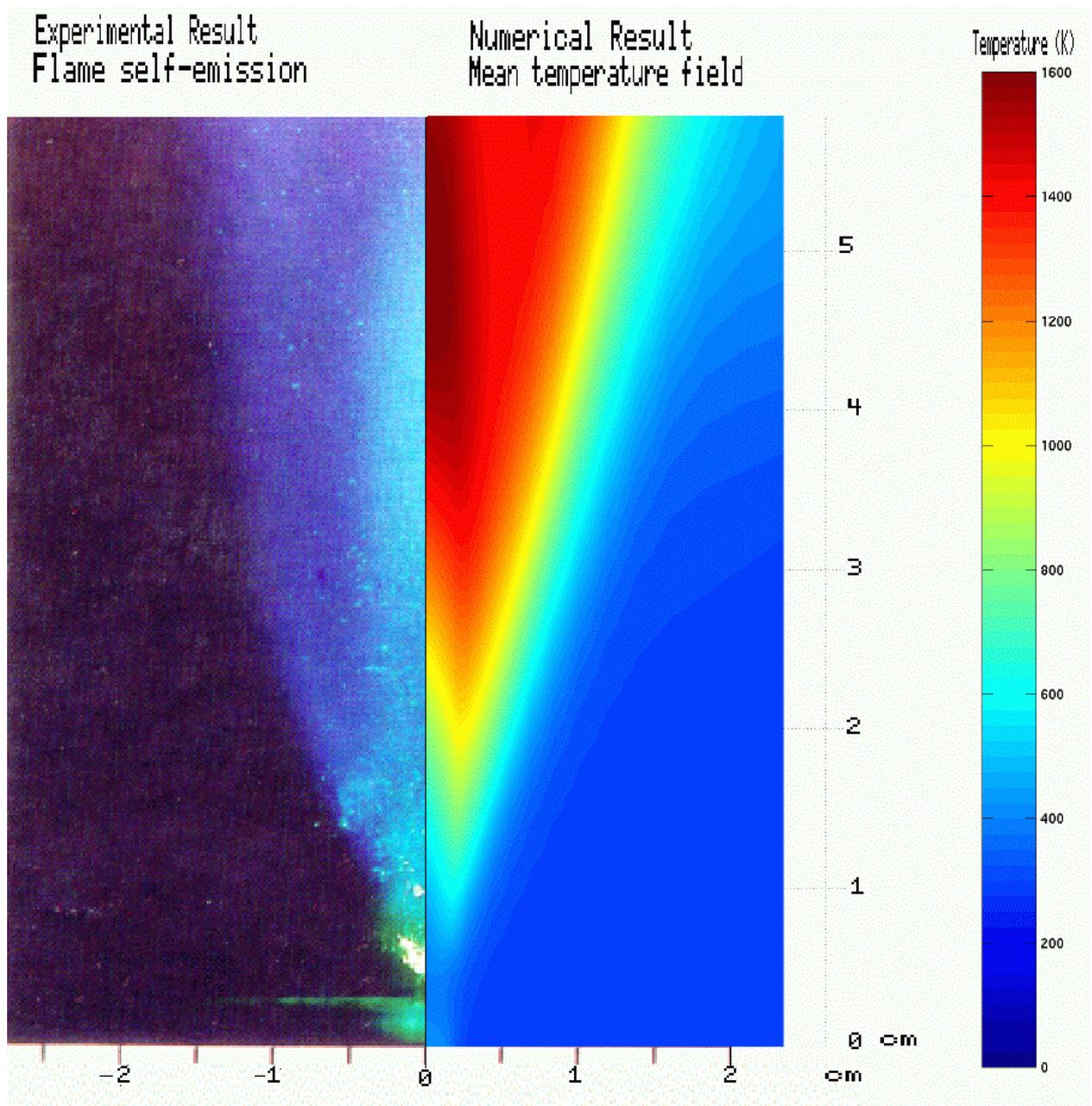


FIG. 6.8 – Comparaison entre une photographie de la flamme et le champ de température calculée dans le cas LDU

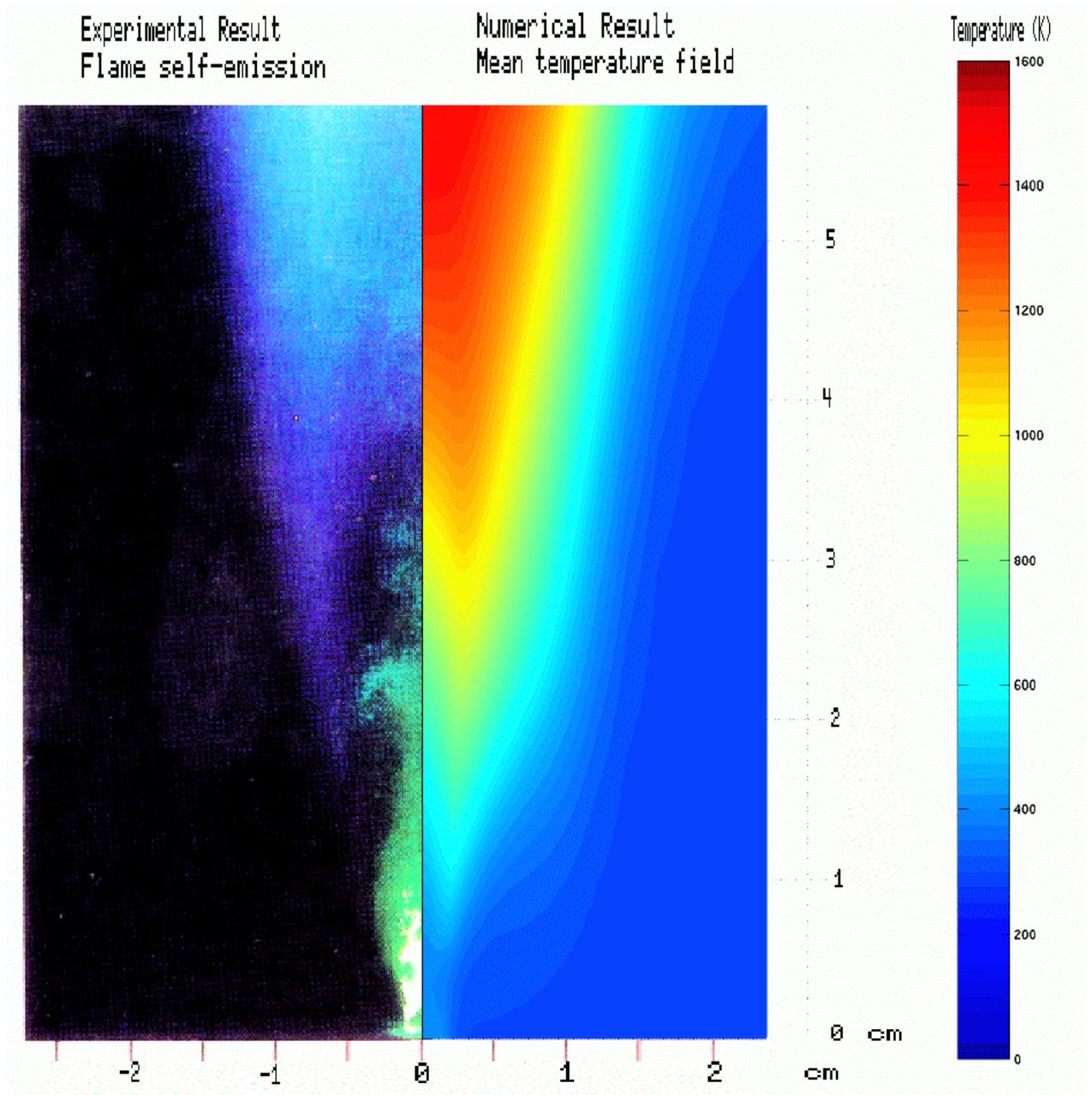


FIG. 6.9 – Comparaison entre une photographie de la flamme et le champ de température calculée dans le cas HDU

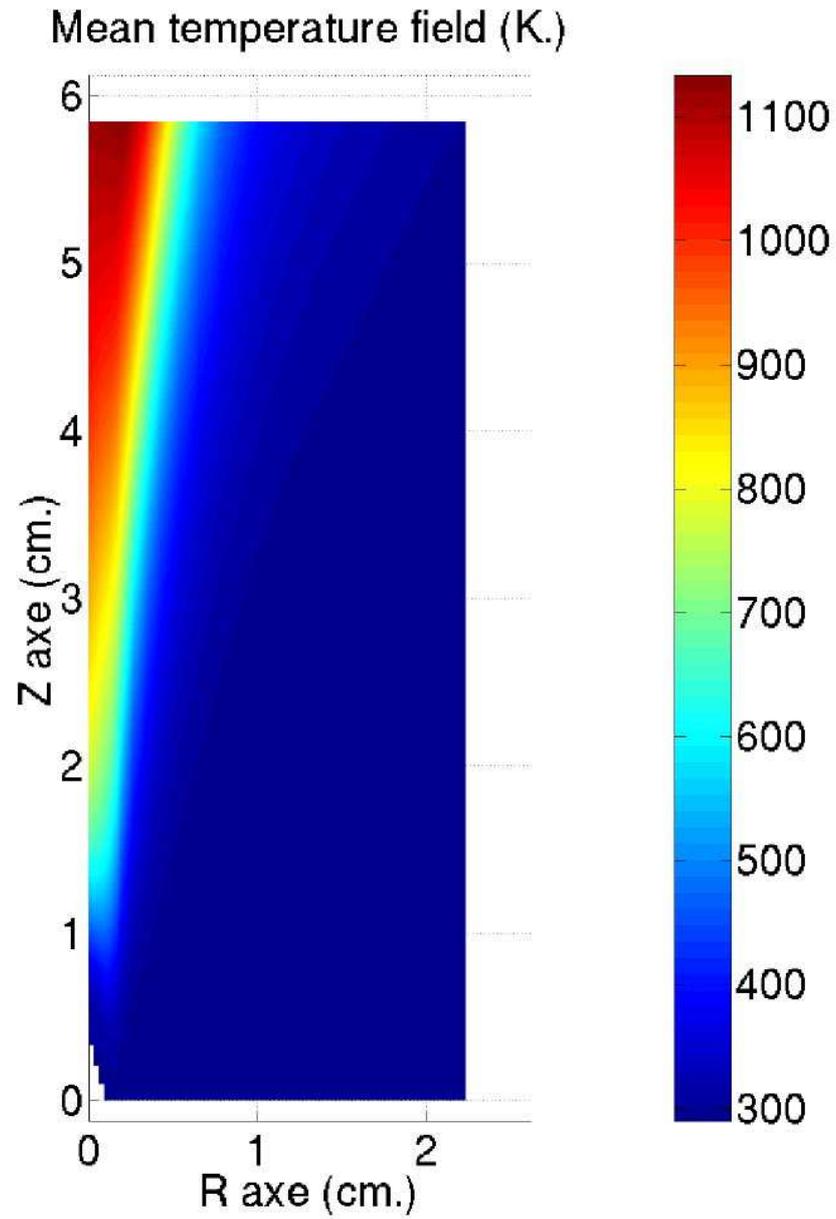


FIG. 6.10 – *Champ de température moyenne $\tau_Z = 0.2 \frac{k}{\varepsilon}$*

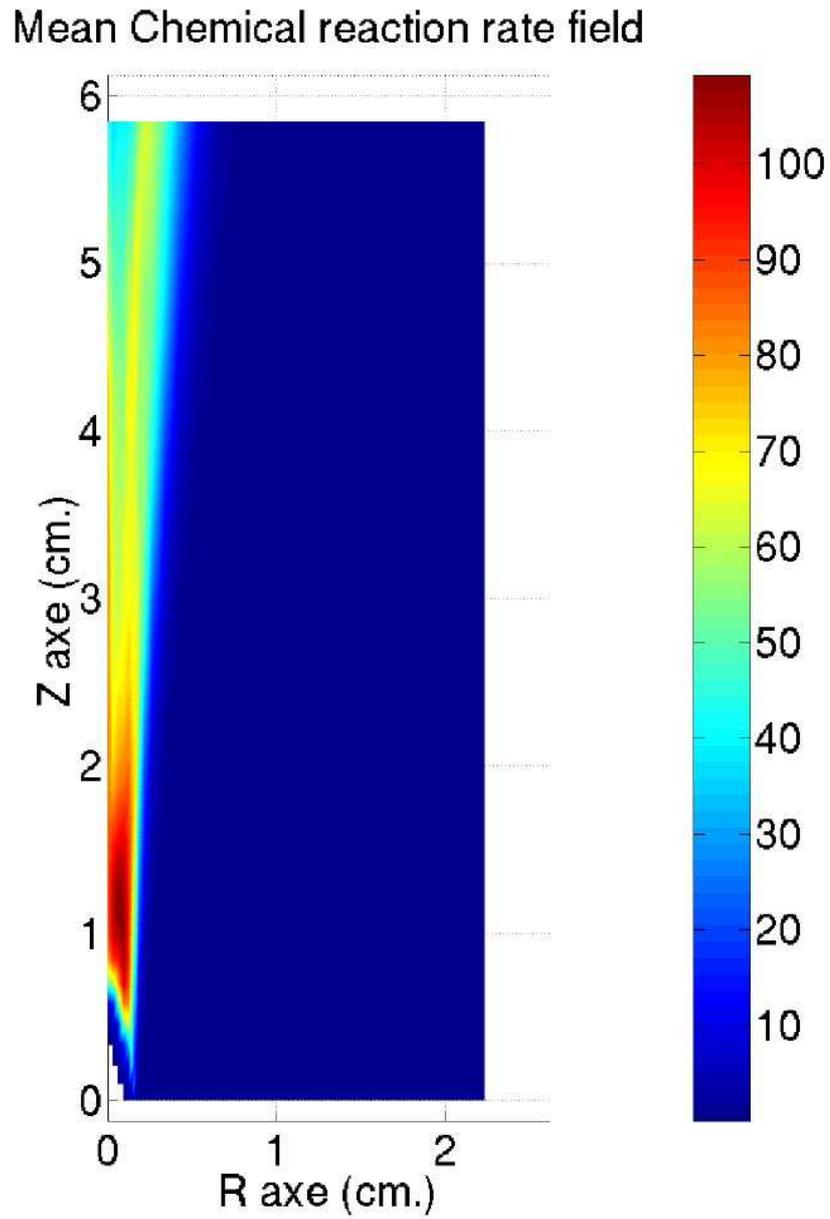


FIG. 6.11 – *Champ du taux de réaction moyen $\tau_Z = 0.2 \frac{k}{\epsilon}$*

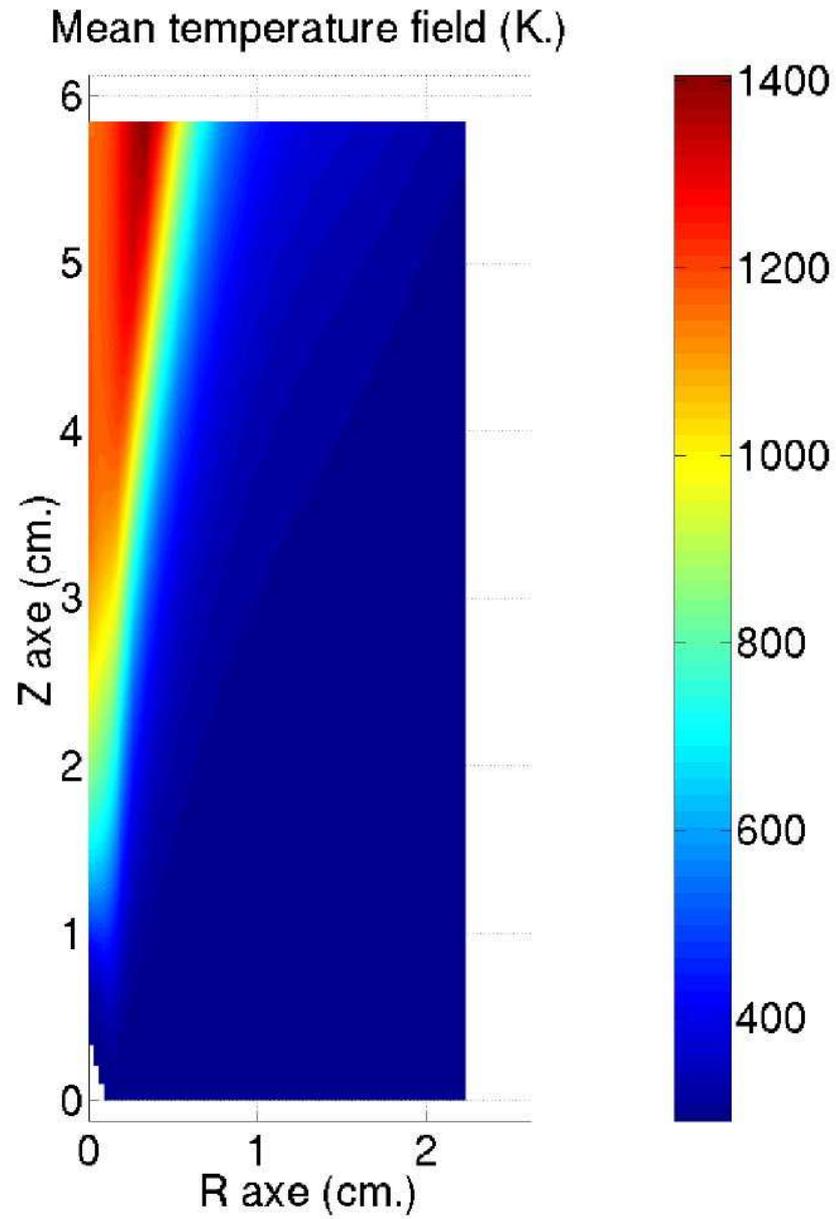


FIG. 6.12 – *Champ de température moyenne $\tau_Z = 0.1 \frac{k}{\epsilon}$*

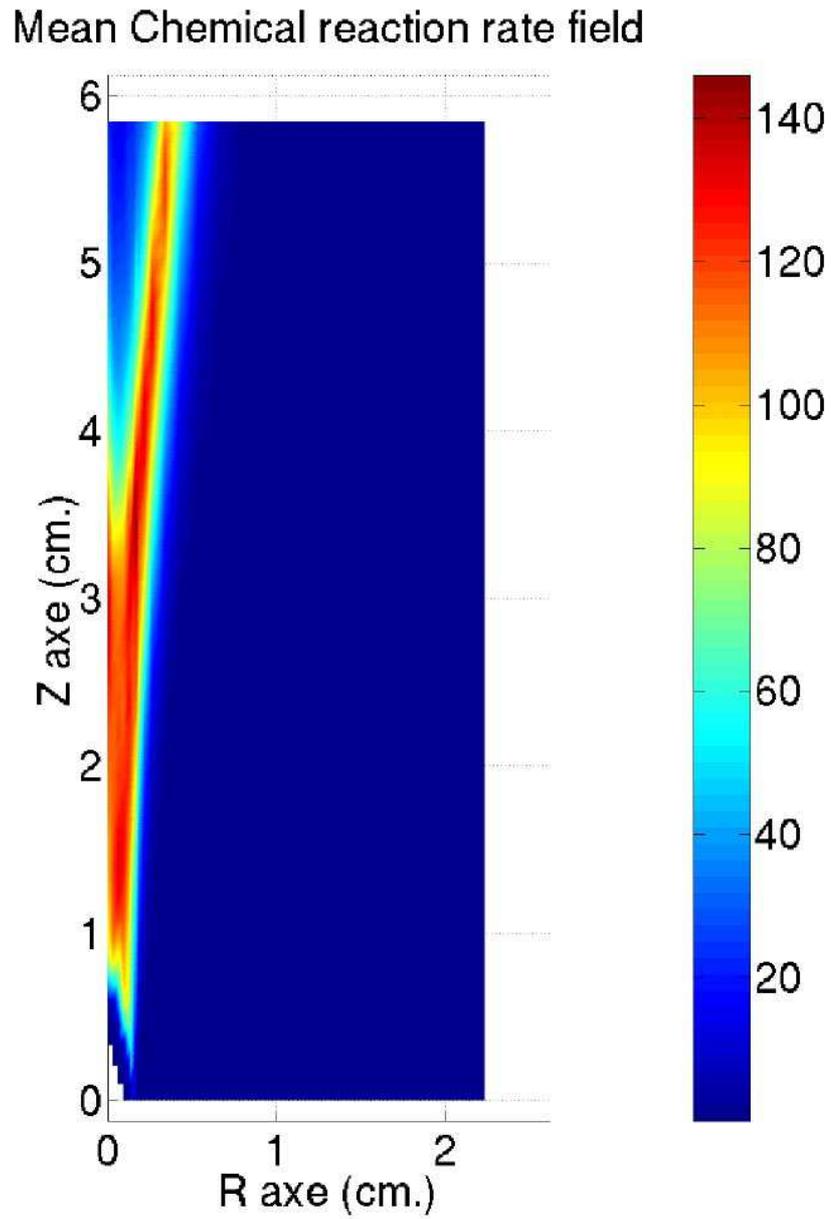


FIG. 6.13 – *Champ du taux de réaction moyen $\tau_Z = 0.1 \frac{k}{\epsilon}$*

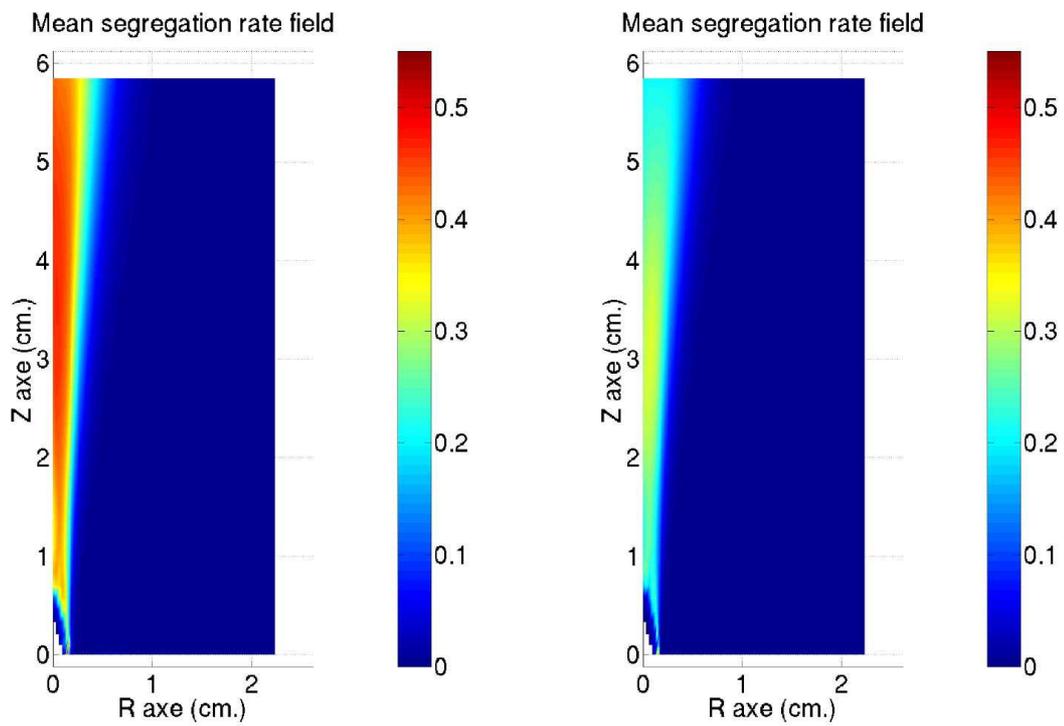


FIG. 6.14 – Comparaison des champs de taux de ségrégation moyen: $S_r = \frac{\widetilde{Z}^2}{\widetilde{Z}(\widetilde{Z}_i - \widetilde{Z})}$. A gauche $\tau_Z = 0.1 \frac{k}{\epsilon}$ et à droite $\tau_Z = 0.2 \frac{k}{\epsilon}$

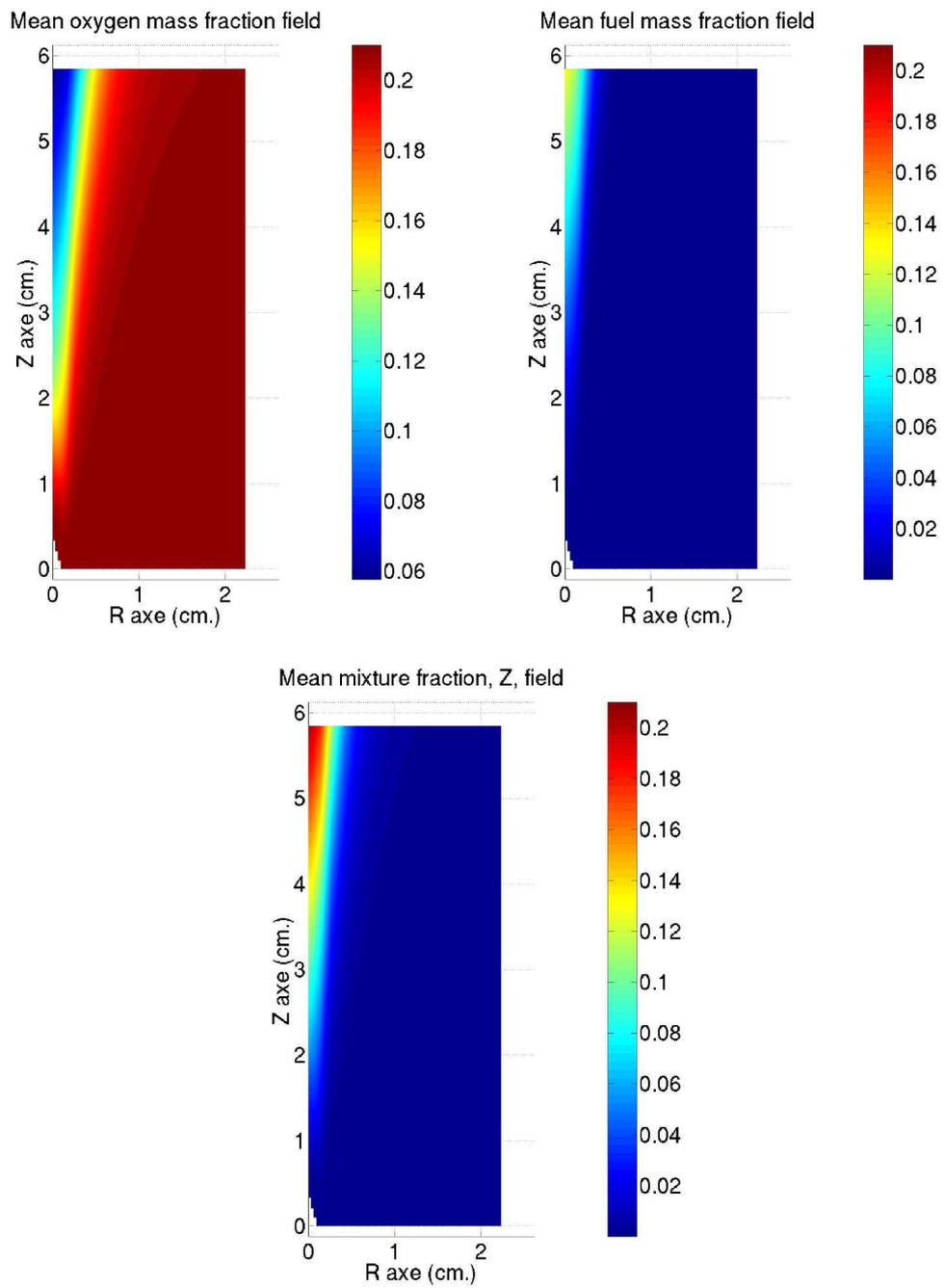


FIG. 6.15 – Comparaison des champs de fraction massique moyenne, de gauche à droite: \widetilde{Y}_{O_2} , \widetilde{Y}_f et en-dessous: \widetilde{Z}

réalité expérimentale dans le cas non réactif. Ce qui devrait permettre de lever les indéterminations sur les conditions d'entrées.

6.3 Auto-inflammation d'un spray de type Diesel

Il s'agit d'une expérience réalisée par l'IFP [102] pour améliorer la connaissance de l'injection et de l'auto-inflammation d'un spray Diesel. De nombreux travaux à l'IFP [53] et à la direction de la recherche de Renault [42], ont été dédiés à la modélisation de l'injection et de l'atomisation afin de retrouver les résultats expérimentaux. Nous avons pu bénéficier de ce travail pour pouvoir séparer le problème de la combustion de celui de l'atomisation. Le modèle de combustion et les constantes qui lui sont attachées n'ont pas été modifiés par rapport à l'expérience précédente.

6.3.1 Description de l'expérience

L'expérience consiste en une chambre de combustion qui peut être chauffée et qui supporte de hautes pressions et de hautes températures. Ceci permet d'utiliser des conditions de pression et de température proches de celles rencontrées dans un moteur Diesel et dans un milieu plus contrôlé que celui que l'on rencontre dans un moteur réel. Cette expérience est ainsi bien adaptée pour étalonner les modèles utilisés ensuite dans des géométries plus compliquées.

La cellule de combustion peut recevoir cinq hublots de 80 millimètres de diamètre. Sur la face supérieure est installé un injecteur Diesel, Figure: 6.16. Le fuel injecté est constitué d'un seul combustible, le dodécane. Enfin les mouvements du fluide dans la bombe sont principalement dus à l'injection.

De manière à obtenir une température suffisamment élevée dans la chambre de combustion avant l'injection, les gaz sont préchauffés par précombustion. Le vide est d'abord fait dans la chambre puis, une proportion précise de quatre gaz (N_2 , H_2 , C_2H_4 , et O_2) remplit la bombe. Ces gaz sont mélangés puis allumés à l'aide de quatre bougies. La combustion prend environ 150 millisecondes puis le refroidissement, de ces gaz par les parois prend quelques secondes. Durant le refroidissement la pression et la température qui se sont élevées durant la combustion décroissent lentement. L'injection est alors déclenchée quand les valeurs choisies sont atteintes. Dans le cas non réactif, la quantité d'oxygène initialement dans la chambre correspond exactement à la quantité qu'il faut pour brûler le C_2H_4 . Ainsi l'injection se fait dans un milieu sans oxygène ce qui empêche la combustion. Dans le cas réactif l'oxygène est introduit en excès de manière à ce qu'il reste une quantité d'oxygène semblable à celle que l'on aurait dans l'air après la précombustion. Les proportions volumiques de chaque espèce après la précombustion sont récapitulées dans ce tableau:

	Sans O_2	Avec O_2
% CO_2	1.7	1.7
% H_2O	11.4	11.4
% N_2	86.9	65.9
% O_2	0	21
Masse molaire (g.)	28.0	27.1

Deux techniques permettent de visualiser la partie liquide et la partie vaporisée du spray. Il est possible de mesurer la diffusion de Mie émise par le jet liquide et par les gouttelettes

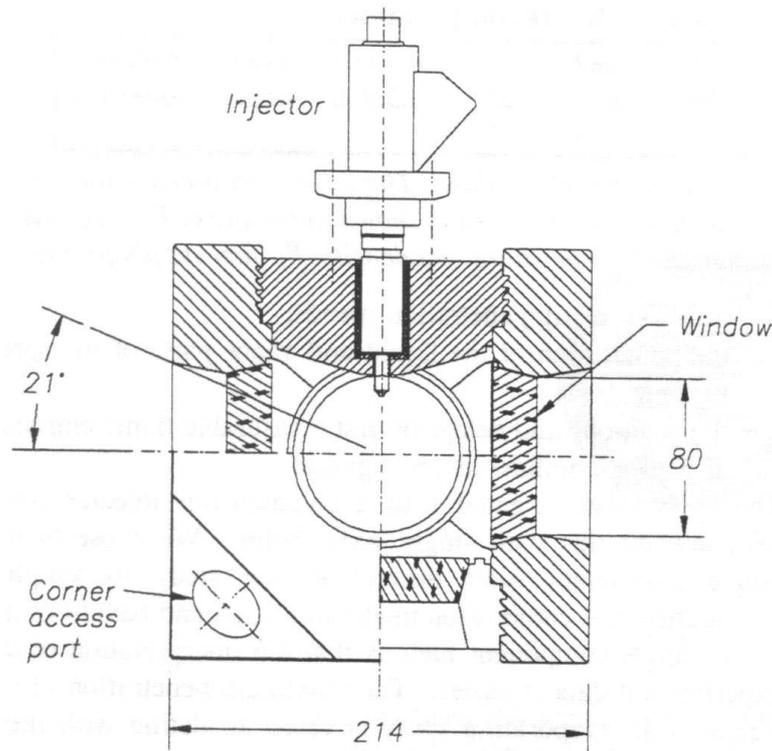


FIG. 6.16 – Cellule de combustion haute pression et haute température de l'IFP, [102]

d'un "traceur de vapeur". Le traceur est un lubrifiant utilisé pour les systèmes Diesel et qui se vaporise moins vite que le combustible. Ainsi chaque gouttelette de combustible qui s'évapore laisse derrière elle une gouttelette de ce traceur qui est visible par Diffusion de Mie. Pour les très hautes températures ce traceur finit par s'évaporer et la vapeur de fuel est directement observée par ombroscopie, Figure: 6.17.

Une caméra rapide est utilisée pour observer la lumière émise par la flamme, lors de l'auto-allumage et de la combustion. Un exemple de séquence d'allumage est présenté sur la Figure: 6.18. Les images se succèdent dans le temps de bas en haut et de gauche à droite. La caméra prend à peu près 10000 images par seconde, cette série représente donc à peu près les premiers 1.5 ms de la combustion. Les premières lueurs apparaissent sur la cinquième ou la sixième image, la température initiale est de 1100 degrés Kelvin. Pour une température initiale de 800 degrés Kelvin le délai d'auto inflammation moyen trouvé est d'environ 0.8 milliseconde. Après s'être allumée, la flamme progresse dans le sens du courant pour prendre une forme arrondie. Elle est détachée de l'injecteur.

6.3.2 Simulation

La simulation de l'injection et de l'atomisation ainsi que du taux de pénétration de la phase vapeur ont été effectuées dans le cas sans combustion à la direction de la recherche de RENAULT. Le modèle Wave développé par Reitz [91] est le modèle de 'breakup' FIPA basé sur les corrélations expérimentales de Pilch et *al* [86] de la même façon que Habchi et *al* dans [53]. Le maillage utilisé a la forme de la chambre de combustion expérimentale,

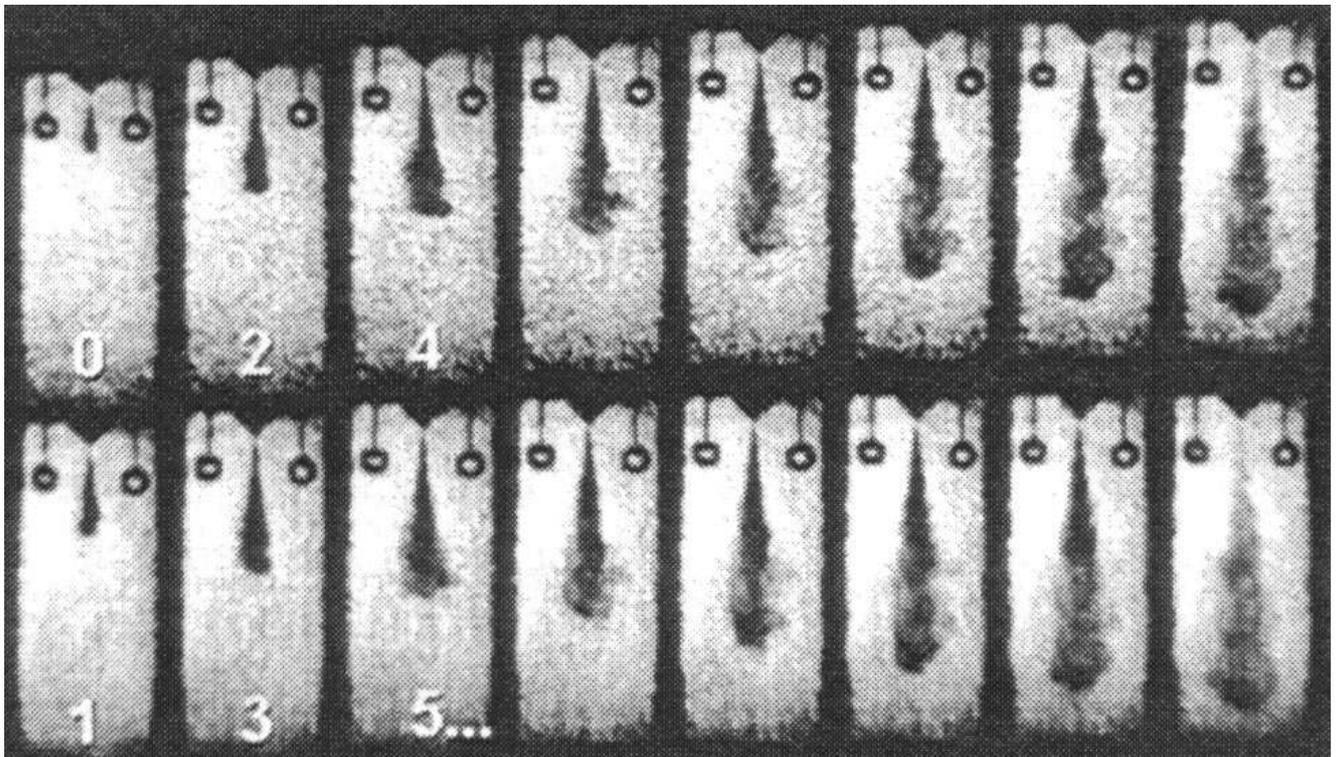


FIG. 6.17 – Ombroscopie du spray de dodécane et de sa vapeur, [102]

il est tridimensionnel et comporte $47 \times 47 \times 32 = 70688$ mailles de calcul, Figure: 6.19. Nous avons utilisé exactement les mêmes fichiers d'entrée en ajoutant les données nécessaires à la combustion.

Les modèles de combustion sont exactement les mêmes que ceux utilisés précédemment. La loi chimique utilisée pour déterminer l'emplacement des sauts est de type Arrhenius pour une réaction globale pour le dodécane. Cette loi et ses coefficients sont les mêmes que ceux de la loi (6.1). La simulation a été effectuée sur une Silicon Origine 200 et prend à peu près 12 heures dans le cas sans réaction et moins de 13 heures dans le cas avec réaction. Cela souligne l'efficacité de la modélisation choisie qui ne rajoute quasiment pas de temps de calcul. Le cas choisi est le cas de référence avec une pression d'injection de 80 bars, une température initiale dans la chambre de 800 degrés Kelvin et une masse volumique de $\rho = 25 \text{ (kg/m}^3\text{)}$.

6.3.3 Résultats

Nous avons effectué plusieurs simulations pour mettre en évidence l'importance des différentes approches et des différentes approximations utilisées. La Figure: 6.20 représente le champ de température obtenu après 1.6 milliseconde avec le modèle basé sur l'hypothèse de chimie infiniment brusque, en supposant une haute énergie d'activation pour la réaction globale et un seul temps de mélange moyen. Il s'agit d'une coupe dans le plan central, c'est pourquoi il est possible de voir la zone froide au centre qui contient le liquide en train de s'évaporer. La forme de la flamme est très semblable à celle observée à la fin de la série de mesure, Figure: 6.18, qui correspond à peu près au même temps. Les photos prises dans l'expérience

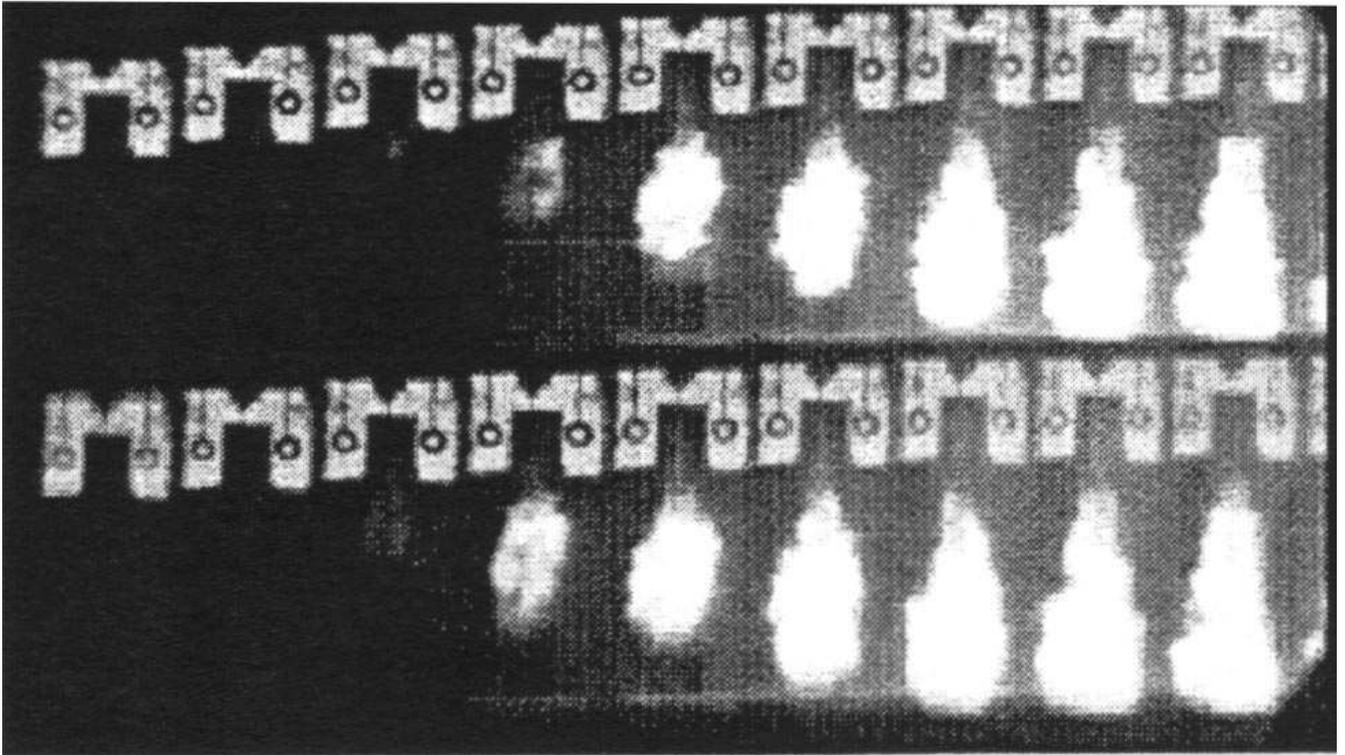


FIG. 6.18 – Visualisation de l'auto-allumage et de la flamme qui se propage par caméra rapide, la lumière est celle générée par la combustion , [102]

ne permettent pas de voir la zone froide du milieu puisque celle-ci est cachée par l'enveloppe extérieure de la flamme.

La Figure: 6.21 montre une série de champs de température toujours prise dans le plan de coupe centrale au cours du temps. Les différents champs sont espacés de 0.1 ms.

Les premières images ne montrent pas d'élévation notable de la température, celle-ci se fait après un certain temps. La Figure: 6.22 représente la quantité de vapeur évaporée, c'est-à-dire \tilde{Z} , au temps 0.2 milliseconde, ce qui correspond à la deuxième image de la Figure: 6.21. Le délai d'auto-allumage pourrait être dû au temps que met le liquide pour s'évaporer. Or sur cette figure il existe déjà suffisamment de vapeur de combustible en moyenne pour permettre la combustion, puisque \tilde{Z} est dans une bonne partie supérieure à 0.066 qui correspond à une richesse unité. Ce n'est donc pas le manque de vapeur qui empêche l'inflammation du mélange. C'est le milieu gazeux qui n'a pas eu le temps de s'enflammer. Cet effet est pris en compte dans le modèle MIL à travers le calcul de l'emplacement des sauts des particules fluides dans leur trajectoire qui les rapproche de la valeur moyenne. Le temps de présence des vapeurs de combustible depuis leur évaporation est estimé par le taux de ségrégation. Si celui-ci est élevé cela veut dire que les fluctuations initiales n'ont pas encore eu le temps de se dissiper, et que la majorité des particules fluides de combustibles se sont évaporées depuis un temps très court. La Figure: 6.23 montre une coupe du champ de ségrégation $(\frac{\tilde{Z}^2}{Z(\tilde{Z}_i - \tilde{Z})})$ qui est élevé là où il y a de la vapeur, donc les vapeurs de combustibles sont là depuis trop peu de temps pour pouvoir s'être enflammées. Le champ n'est pas tout à fait symétrique

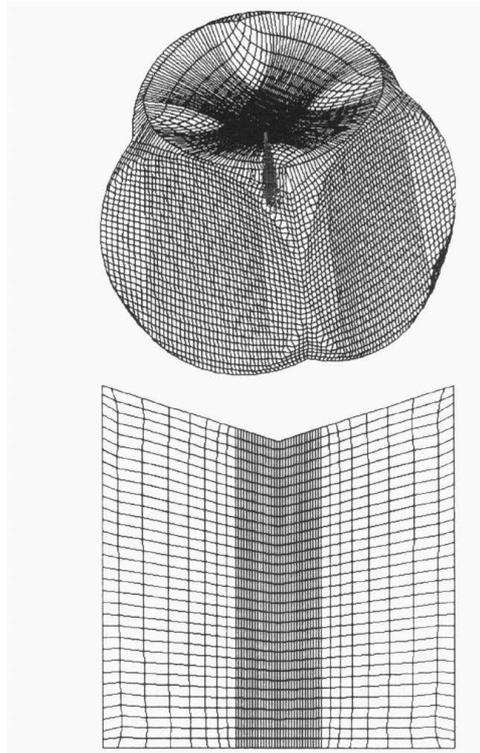


FIG. 6.19 – Maillage utilisé pour le calcul, la taille caractéristique des mailles dans la direction radiale au niveau du spray est 1 millimètre.

cela pourrait être dû à des fluctuations numériques ou au maillage qui n'est pas parfaitement symétrique. Le taux de ségrégation est une valeur délicate à calculer car si \tilde{Z} est petit alors le taux de ségrégation est égal à un rapport de deux quantités qui tendent vers zéro. Finalement le délai d'auto-inflammation a été mesuré sur plusieurs expériences comme le premier instant où la lumière émise par la flamme devenait visible. Cette lumière devrait être due aux suies qui commencent à émettre de la lumière vers 1700 degrés Kelvin.

En moyenne cette zone est atteinte dans l'expérience après environ 0.8 milliseconde. Dans le calcul les premières zones où la température est de cet ordre, apparaissent entre la sixième et la septième image, soit environ 0.6 à 0.7 milliseconde. Cette valeur n'est pas parfaite mais elle donne le bon ordre de grandeur. Il semble donc que dans ce cas, où les calculs de l'atomisation et l'injection ont été bien validés, le modèle est capable de reproduire les caractéristiques globales de la flamme. Cela montre que le modèle est capable de représenter le retard de la combustion dû au délai d'auto-allumage.

6.3.4 Discussions

Afin de juger de l'importance du calcul de la combustion, quand l'injection et l'atomisation sont bien calculées, nous avons refait une simulation avec le modèle qui suppose la chimie infiniment rapide Figure: 6.24 Les échelles de couleur pour la température sont les mêmes que pour le cas de la chimie infiniment brusque. Il apparaît clairement que la flamme est très différente. Le maximum de température dépasse l'échelle de couleur, il se situe à environ

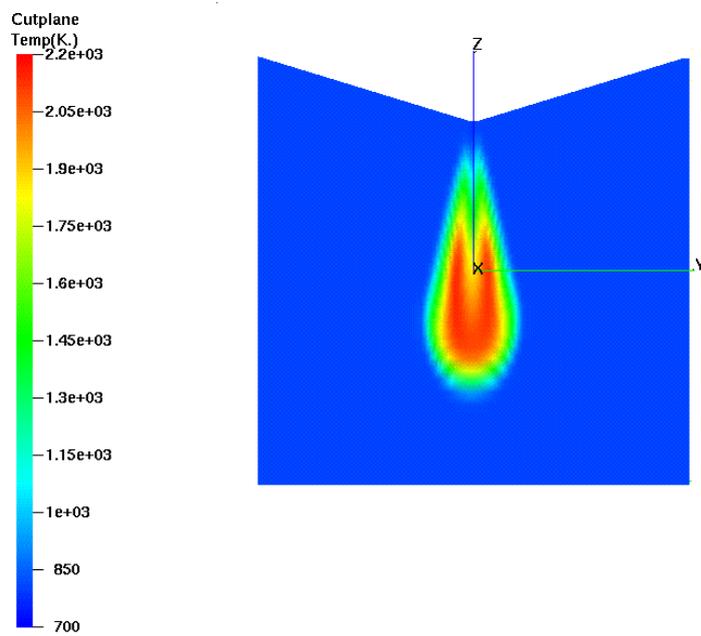


FIG. 6.20 – Coupe centrale du champ de température moyenne, 2ms après le début de l'injection

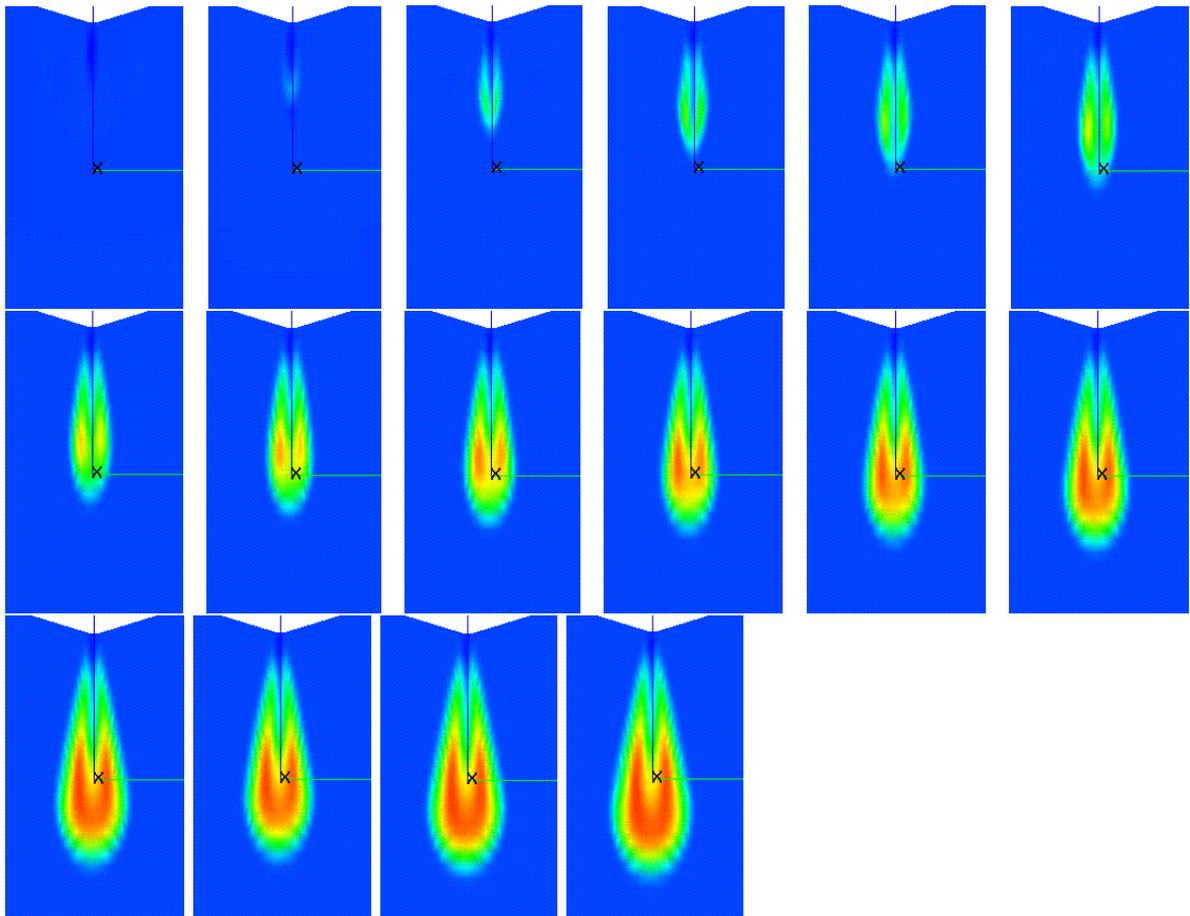


FIG. 6.21 – Auto-allumage et développement de la flamme. Evolution de la température dans le cas de la chimie infiniment brusque.

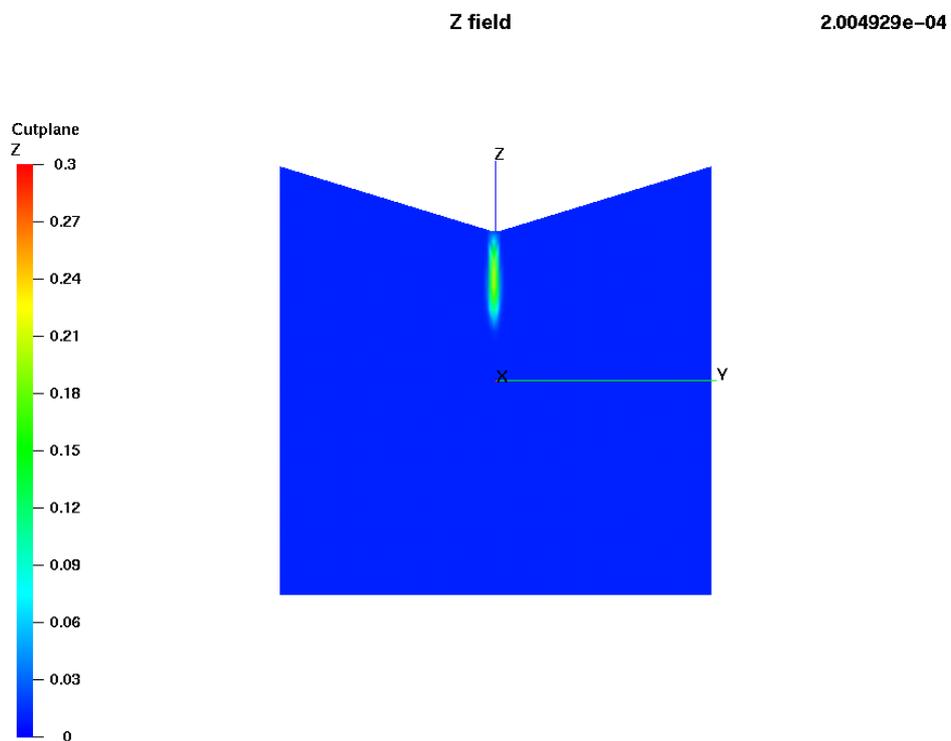


FIG. 6.22 – Champ de \tilde{Z} à 0.2ms après l'injection. Au centre le mélange est supérieur en moyenne à la valeur stœchiométrique de Z, $Z_s = 0.066$.

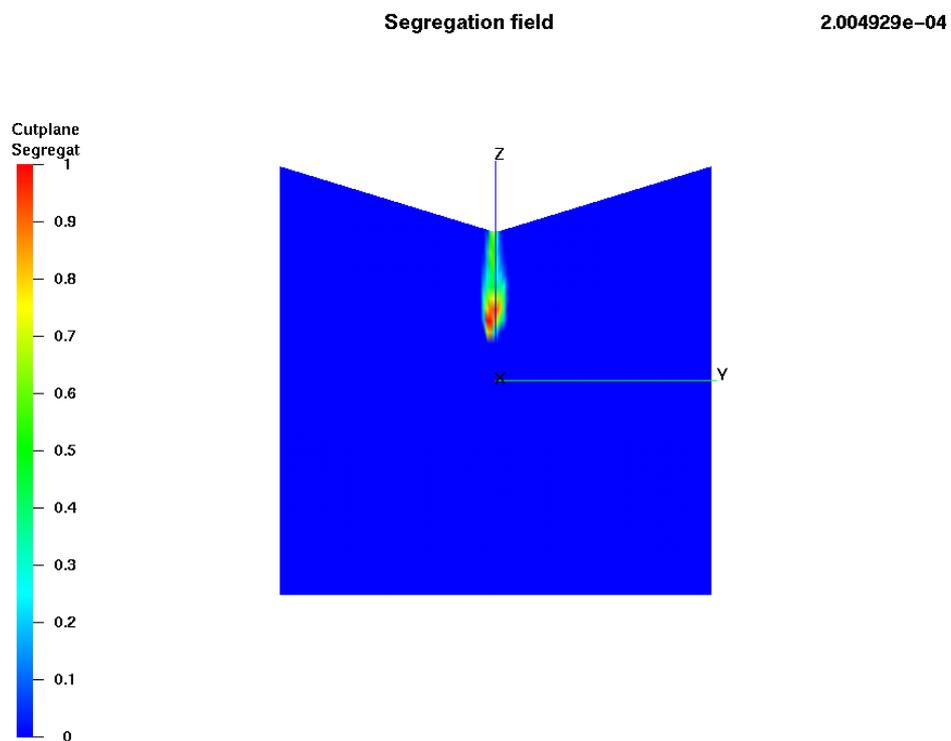


FIG. 6.23 – *Champ du taux de ségrégation Z à 0.2ms après l'injection. Les grandes valeurs indiquent que le milieu ne sait pas encore assez mélangé pour pouvoir brûler*

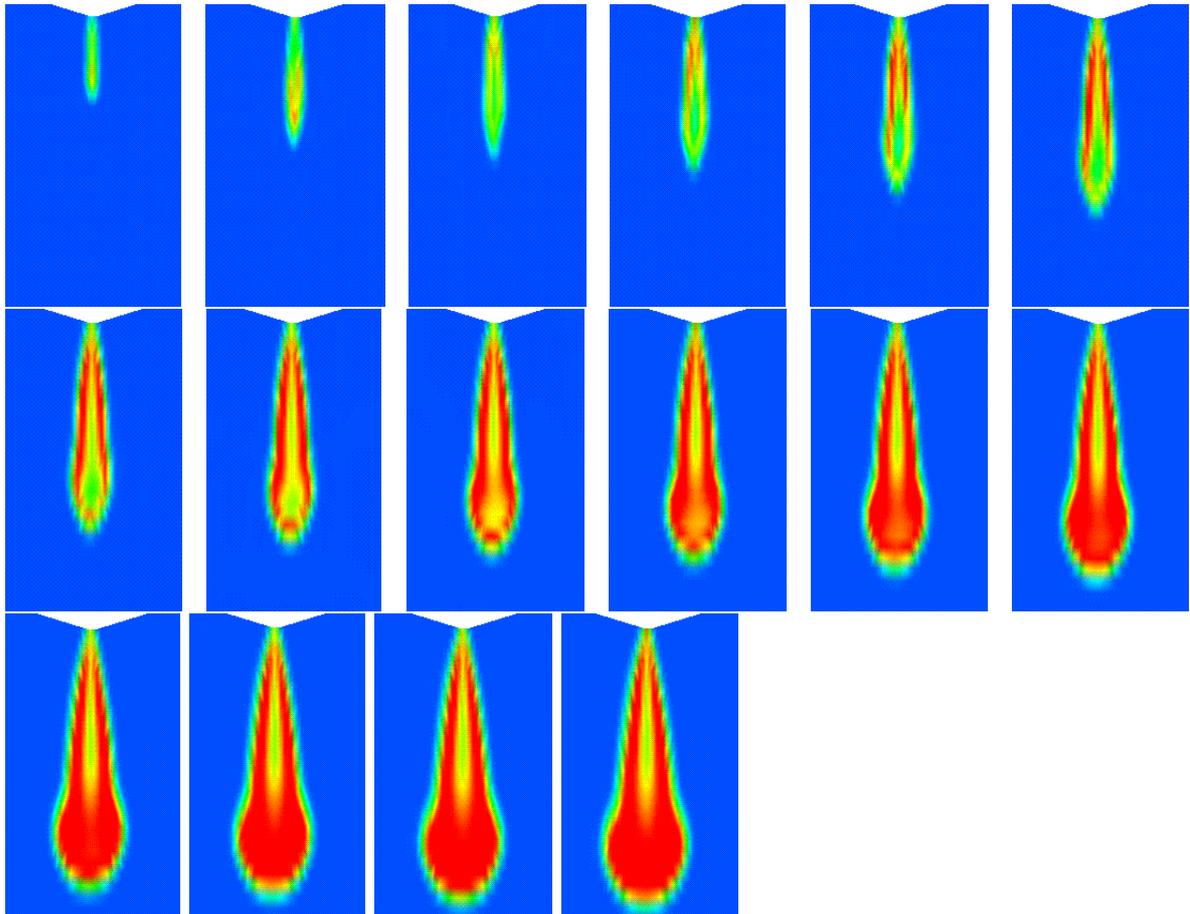


FIG. 6.24 – Evolution de la température dans le cas de la chimie infiniment rapide

2500 degrés Kelvin. De plus la flamme apparait dès le début, il n'y a aucun délai d'auto-inflammation. Plus tard on voit que la flamme reste accrochée au bord de l'injecteur ce qui n'est pas le cas dans les mesures. Il apparait donc important de prendre en compte des effets de chimie non infiniment rapide pour bien simuler ce genre de flamme. De plus les fortes températures auront un effet sur le liquide qui s'évaporerait plus, libérant plus de vapeur ce qui accélérerait encore la combustion.

Nous avons fait une simulation où les termes sources de fluctuation dus à la vaporisation dans l'équation de \widetilde{Z}''^2 ont été supprimés pour se rendre compte de leur effet. La Figure: 6.25 montre en haut le cas de calcul où les termes ont été supprimés et en bas quand ils ont été activés. Ces termes sont clairement des termes sources et le taux de ségrégation est plus fort en bas qu'en haut. Il y a un effet notable sur le champ de température. Ces termes dans ce cas semblent favoriser la combustion puisque la température quand on tient compte de ces termes est de 100 degrés supérieure par endroit au cas où ces termes ont été annulés. Les termes dus à la vaporisation qui augmentent les fluctuations jouent donc un rôle. Dans cette équation l'autre terme de création de fluctuation est dû au gradient de la valeur moyenne de Z . Les premières fluctuations sont dues à la disposition aléatoire des gouttes dans l'écoulement et donc des sources de vapeur. C'est ce que représentent les termes dus à la vaporisation dans l'équation de \widetilde{Z}''^2 . Si l'on n'en tient pas compte les gradients moyens de concentration de vapeur finissent par créer eux aussi des fluctuations. Il se peut que ce second terme soit important, notamment ici, où le fuel n'est injecté qu'au centre, il existe un fort gradient de \widetilde{Z} du centre vers l'extérieur. Néanmoins ce n'est pas le seul mécanisme et dans un milieu homogène en moyenne, seules les fluctuations créées par l'évaporation existent.

Nous avons aussi testé l'influence de la variable \overline{Z}_i qui nous est apparue importante dans la modélisation. Nous avons donc effectué un cas de calcul où cette variable est prise constante et égale à l'unité comme ce serait le cas dans un écoulement purement gazeux. Les termes dus à la vaporisation pour l'équation des fluctuations de Z sont conservés. La Figure: 6.26 montre le champ de température après 1.6 milliseconde, en haut avec \overline{Z}_i constant égal à un et en bas \overline{Z}_i est calculé par l'équation de transport dérivée au chapitre précédent. La différence est flagrante, dans le cas où l'on ne tient pas compte de cette nouvelle variable la flamme est quasiment éteinte. La Figure: 6.27 montre le champ de valeur de \overline{Z}_i dans le cas où cette variable est calculée. Tout le champ, \overline{Z}_i , est très inférieur à un. En effet le combustible utilisé est le dodécane qui a une température d'ébullition élevée, comme le liquide n'est pas suffisamment échauffé, la concentration de vapeur de combustible à la surface est très loin de l'unité. Un des effets de cette variable est de resserrer toute la PDF de Z près de zéro où se trouve notamment la valeur de Z correspondant à la richesse un. Quand cette variable est maintenue égale à un la PDF de Z est étalée vers des richesses ne permettant pas la combustion ce qui a pour effet d'éteindre la flamme.

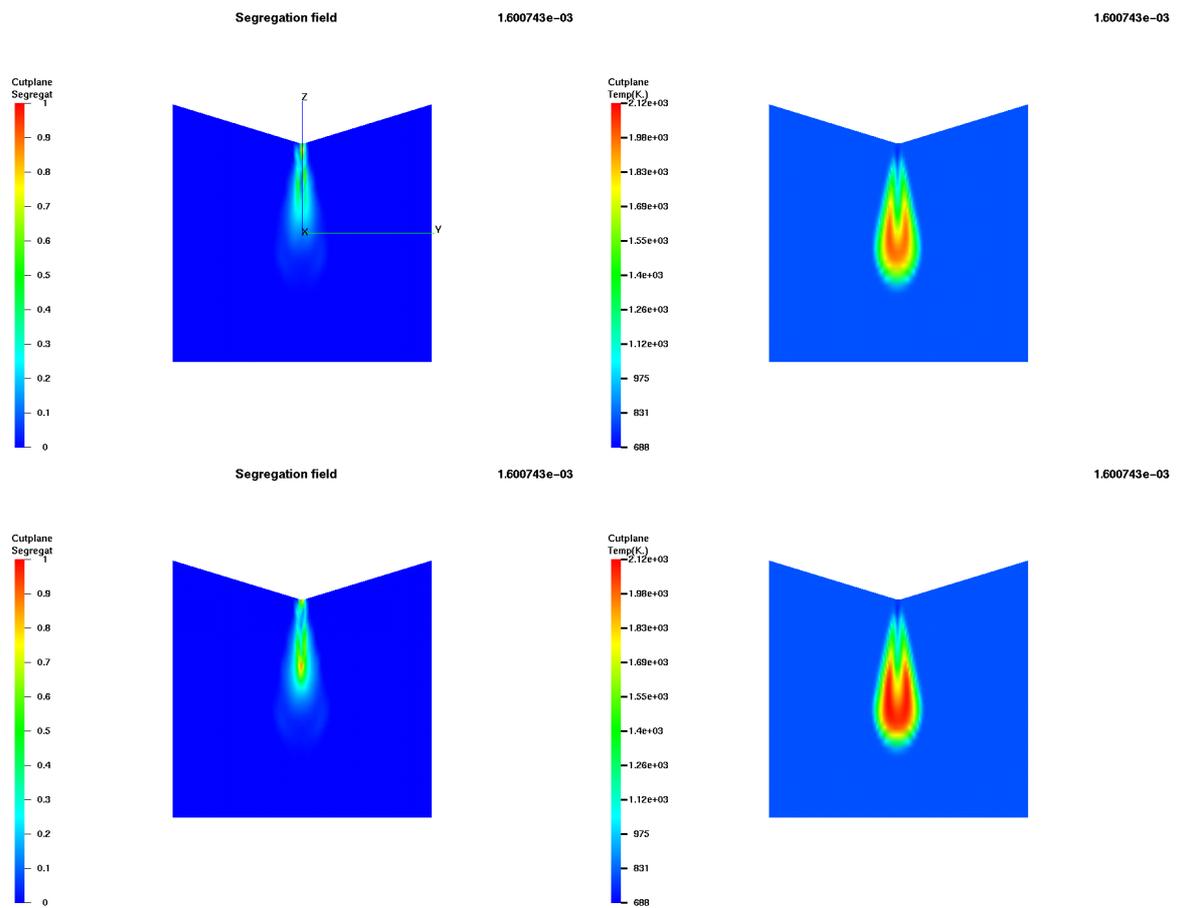


FIG. 6.25 – Effets des termes liés à l'évaporation dans l'équation de \widetilde{Z}^{I^2} . Taux de ségrégation et température, sans ces termes (en haut) et avec ces termes (en bas).

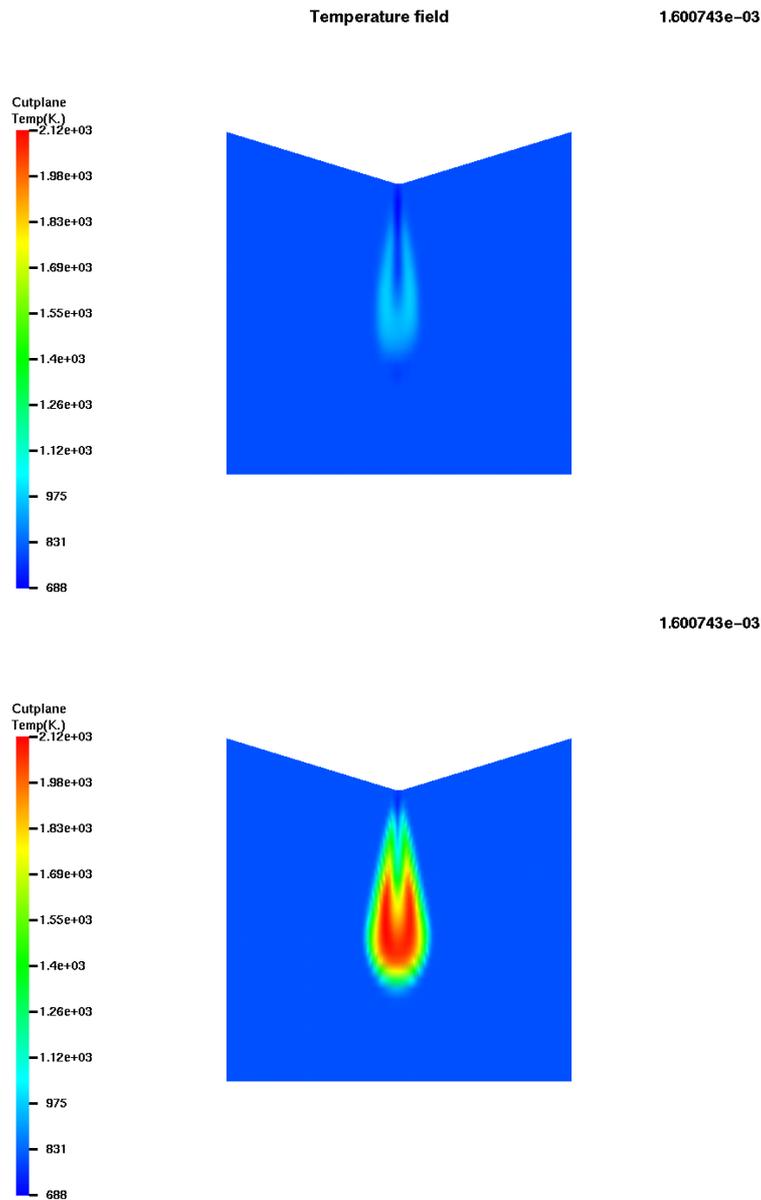


FIG. 6.26 – Effets de la nouvelle variable \overline{Z}_i 1.6 milliseconde après l'injection. En haut cette variable n'est pas calculée, elle est fixée à un comme dans les gaz. En bas elle est calculée partout grâce à une équation de transport.

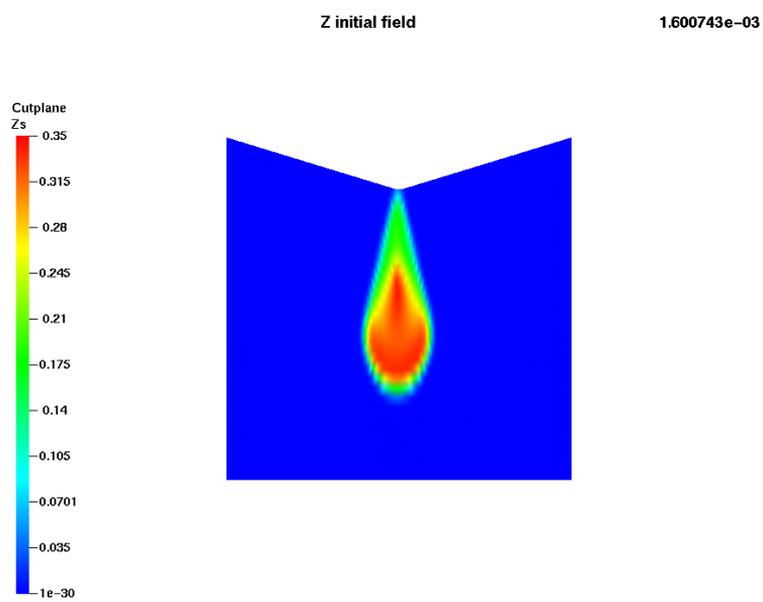


FIG. 6.27 – Champ de la variable \overline{Z}_i dans le cas diphasique, 1.6 milliseconde après l'injection.

Chapitre 7

Conclusion et Perspectives

La modélisation et la simulation numérique de la combustion turbulente d'un milieu réactif turbulent et diphasique a été étudiée. Pour cela il a fallu faire d'abord un travail de recherche fondamentale sur la compréhension des flammes où le fuel est introduit sous forme liquide. Afin de découpler les problèmes il a été supposé que l'introduction du combustible liquide et son atomisation ont été déjà réalisées et que les caractéristiques du brouillard de gouttelettes qui en découlent sont connues. C'est une limite de ce travail, il n'est en effet pas possible de bien calculer la combustion si les caractéristiques initiales de la phase liquide ne sont pas bien connues.

Le problème ainsi posé permet de se consacrer à l'interaction des fines gouttelettes de liquide et de la flamme turbulente. La description théorique et les résultats de certaines expériences ont montré que celles-ci devaient engendrer des fluctuations supplémentaires du fait de la position nécessairement aléatoire des gouttelettes et de leur sillage vaporisé. Ce qui entraîne des plissements ou perturbations supplémentaires de la flamme que ce soit dans le cas laminaire ou dans le cas turbulent.

Le milieu étant composé d'une phase discrète, les gouttelettes, et d'une phase continue, les gaz, il a été choisi de représenter la phase discrète par une méthode Lagrangienne de type Monte-Carlo et la phase continue par une méthode Eulérienne en résolvant des équations moyennes continues.

La description Lagrangienne (classique) du liquide tire parti du fait que le liquide est composé de gouttes. Ce sont des échantillons représentatifs de ces gouttes qui sont décrits, chaque échantillon peut alors être décrit comme une seule goutte évoluant dans un environnement gazeux. Cela permet de calculer les termes d'échanges avec le gaz en considérant le cas d'une goutte seule ce qui simplifie beaucoup le problème.

La phase Eulérienne gazeuse est alors calculée avec les termes d'échanges réciproques de ceux de la phase Lagrangienne. Il reste néanmoins à tenir compte des fluctuations supplémentaires dues à l'évaporation des gouttelettes pour le calcul du taux de réaction. Dans les méthodes classiques, ceci est souvent négligé: il est supposé que les vapeurs venant de la goutte se mélangent de façon très rapide dans le gaz de la maille de calcul où se trouve la goutte. Cette hypothèse n'est pas valable si la chimie est assez rapide. Un tout petit nombre d'études ont été consacrées à ce fait jusqu'à présent. Celles de Durand et *al* [34] [35] en sont un des rares exemples, mais leur méthode de simulation de la PDF des caractéristiques du milieu gazeux est très chère en temps de calcul. Ici on a étudié une approche de "PDF présumée" pour cette PDF d'une ou deux (maximum) variables du milieu gazeux. L'une d'elles est la variable de

mélange Z qui décrit la richesse. Ses fluctuations sont quantifiées par l'équation de sa variance $\overline{Z'^2}$. Celle-ci par rapport aux cas purement gazeux fait apparaître des termes de production supplémentaires dus à l'évaporation des gouttelettes. Grâce à l'écriture locale exacte des équations, qui fait appel aux distributions, et à la description Lagrangienne de la phase liquide, ces nouveaux termes ne nécessitent pas pour être fermés d'hypothèses supplémentaires.

Alors que dans le cas gazeux le combustible est injecté à l'état pur, dans le cas diphasique, lors de son introduction par vaporisation du liquide, celui-ci est déjà partiellement mélangé avec les autres gaz qui entourent la goutte. En effet la concentration de vapeur de combustible maximale se situe à la surface des gouttelettes. Or du moment que celles-ci n'ont pas atteint la température d'ébullition du liquide, d'après la loi de Clapeyron, la fraction massique de vapeur de combustible à la surface est toujours inférieure à un. Pour tenir compte de cette particularité nous avons défini une nouvelle variable qui correspond à la valeur maximale de la concentration de vapeur. C'est aussi la valeur initiale de la concentration des particules fluides de combustible gazeux lorsqu'elles sont lâchées dans les gaz à la surface du liquide. En terme du scalaire caractéristique de la richesse cela correspond à la valeur initiale Z_i . L'influence de cette nouvelle variable sur la PDF de Z a été prise en compte grâce à sa valeur moyenne pour laquelle une équation de transport a été dérivée et fermée sans hypothèses supplémentaires. Une nouvelle façon de présumer la PDF de Z a été proposée qui permet de prendre en compte directement cette nouvelle limite.

Finalement le terme de réaction chimique moyen a été fermé en étendant le modèle de combustion turbulente MIL du cas purement gazeux au cas diphasique. Ce modèle basé sur l'hypothèse de chimie infiniment brusque permet de prendre en compte des phénomènes chimiques tels que le délai d'auto-inflammation et l'extinction quand le mélange turbulent devient trop fort.

La simulation du premier cas de calcul a montré le potentiel du modèle. Cependant l'incertitude sur les caractéristiques de l'atomisation et de l'injection, qui sont un préalable essentiel à la modélisation de la combustion, n'ont pas permis de tirer de conclusion sur la validité de l'ensemble de la modélisation. Il a fallu simuler une autre expérience où l'injection et l'atomisation ont été validées dans le cas non réactif. Cette expérience a montré que le modèle pouvait prédire le bon délai d'auto-inflammation ainsi qu'une forme réaliste de la flamme sans aucun ajustement des constantes du modèle.

Des tests ont été réalisés en supprimant telle ou telle partie de la modélisation pour voir leur influence. Ils ont montré qu'il était nécessaire de prêter une attention suffisante au modèle de combustion même si l'introduction du liquide a été bien calculée. En effet, la flamme étudiée n'est pas uniquement contrôlée par la dispersion et l'évaporation du liquide, elle dépend aussi de l'interaction des réactions chimiques avec le mélange turbulent et le brouillard de gouttelettes. Ainsi dans ce cas la combustion avec l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide, qui ne tient pas compte de ces interactions, ne donne pas un résultat réaliste. De même la flamme calculée change notablement si l'on tient compte des fluctuations engendrées par l'évaporation des gouttelettes ou si l'on n'en tient pas compte. Pour finir si l'on ne calcule pas convenablement la nouvelle variable \overline{Z}_i et qu'on la pose constante, égale à un, comme dans le cas gazeux, la flamme ne s'allume pas du tout. Ce qui montre l'importance de cette nouvelle variable.

Cette modélisation répond aussi à un critère technologique qui est de pouvoir modéliser la combustion turbulente diphasique avec ses caractéristiques importantes, dans le cadre de géométrie complexe telle que l'on en rencontre dans la réalité. C'est-à-dire notamment que le

temps de calcul numérique de la combustion de telle flamme ne doit pas être trop grand. Cette considération a influencé nos choix de modélisation. Ce qui a permis, grâce à un maximum de résolution analytique préalable, d'obtenir d'un temps de calcul comparable dans le cas réactif à ceux obtenus dans le cas non réactif.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses:

1. Il faudrait en premier lieu tester ce modèle de façon plus extensive afin de mieux cerner ses limites. Pour cela il faudrait l'utiliser dans la simulation d'autres expériences. Il faut noter qu'à cause de difficultés techniques les expériences dans le cas de la combustion diphasique turbulente sont moins nombreuses et moins documentées que dans le cas gazeux. Il faut sélectionner des expériences où l'état du mélange diphasique (taille des gouttes, vitesse, quantité) est très bien connu avant combustion. Sinon la méconnaissance de cet aspect ne permettra pas de tester vraiment le modèle de combustion.
2. Une des améliorations essentielles à apporter à ce modèle, comme à beaucoup d'autres, est une meilleure estimation du temps de mélange. En effet pour l'instant celui-ci est estimé à partir des temps de la turbulence uniquement. Or ceux-ci décrivent les évolutions du champ de vitesse. Mais il est très possible, suivant les conditions d'injections, que le champ scalaire diffère fortement du champ de vitesse et qu'ainsi il n'est pas du tout les mêmes échelles de temps caractéristiques.
3. Le modèle de combustion pourrait être raffiné afin de prédire un peu plus que l'avancement de la réaction globale. A l'aide d'hypothèses sur la chimie il pourrait être possible de calculer des espèces autres que les espèces majoritaires.
4. Il est possible que dans les moteurs Diesel l'apparition de suies puissent provoquer un rayonnement de forte intensité. Dans ce cas les gouttes pourraient être chauffées à distance de la flamme. Si c'est le cas cela influencerait le taux d'évaporation donc la richesse locale dans les gaz et finalement le taux de réaction moyen. Ce point mérite donc d'être étudié.
5. Dans certains cas si la chimie est très rapide l'accrochage de la flamme se fait au bord de l'injecteur. Dans ce cas le liquide n'est pas encore sous forme d'un brouillard de gouttelettes. Il faudrait alors étudier comment coupler le modèle de combustion et d'atomisation dès le début du jet. La modélisation de l'atomisation pose encore beaucoup de problèmes cependant.
6. Ce type de modèle pourrait peut-être être applicable à la combustion de fines particules de charbon. Celles-ci se comportant comme des gouttelettes, la sublimation du charbon pourrait être traitée de la même façon que l'évaporation des gouttelettes. C'est-à-dire en se basant sur la combustion d'une particule de charbon seule dans du gaz. Cette "évaporation" produit alors du CO qui doit brûler dans les gaz de la même façon que les vapeurs de combustible.
7. ...

Chapitre 8

Nomenclature

- a est la diffusivité thermique $a = \frac{\lambda}{\rho c_p}$;
- 1. A constante pré-exponentiel dans la loi d'Arrhénius;
- 2. A est l'aire de la surface de flamme;
- a_d indice signifiant adiabatique;
- b indice pour une variable dans un milieu brûlé;
- B est le paramètre de Spalding;
- C_D coefficient de traînée;
- c est la variable d'avancement;
- c_p est la capacité calorifique;
- $C_\mu = 0.09$ est une constante du modèle de turbulence;
- d est le diamètre de la goutte;
- D_β est le terme d'échange de quantité de mouvement entre phase dû à la traînée;
- D_a nombre de Damköhler;
- D_i est le coefficient de diffusion laminaire;
- D_t est le coefficient de diffusion turbulent;
- D_{32} diamètre de Sauter;
- e est l'énergie interne;
- e_l épaisseur de flamme laminaire;
- E_a énergie d'activation;
- F_g fraction du fuel gazeux dans le fuel liquide;
- g est l'indice indiquant une quantité propre aux gaz;

- G_β est la résultante des forces de volume projetée dans la direction β ;
- G nombre caractérisant la densité de goutte;
- h est l'enthalpie chaleur de formation incluse;
- IEM qui se réfère aux trajectoires dans l'espace des phases pour du mélange pur modélisé avec le modèle IEM;
- i indice caractérisant une donnée initiale;
- J endroit des sauts d'allumage suivant l'axe des Z ;
- k énergie cinétique de la turbulence;
- K indice signifiant une échelle de Kolmogorov;
- \vec{J}_f vecteur flux;
- k indique une quantité pour une particule stochastique ' k ';
- $L_e = \frac{u}{D}$ est le nombre de Lewis;
- l distance moyenne inter-gouttes;
- L_v est la chaleur latente de vaporisation;
- l_t échelle spatiale intégrale de la turbulence;
- l_k échelle spatiale de Kolmogorov de la turbulence;
- l_e échelle spatiale de l'écoulement;
- l est l'indice indiquant une quantité propre au liquide;
- \mathcal{M} est la masse molaire;
- MIL qui se réfère aux trajectoires dans l'espace des phases pour le modèle MIL;
- \dot{m} est le débit massique;
- n_d nombre de gouttes par unité de volume;
- N est l'indice indiquant une quantité propre à l'azote;
- o est l'indice indiquant une quantité propre à l'oxygène;
- ov est l'indice indiquant une variable totale, gaz et liquide;
- $P()$ est la fonction de densité de probabilité;
- $\mathcal{P}()$ est la "fine grained PDF";
- \mathcal{P}_g est le terme lié à la discontinuité de pression à l'interface;
- $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$ est le nombre de Prandtl;

- p ou P est la pression;
- p_v est la pression de vapeur saturante;
- $Q_t^{(k)}$ est le terme d'échange de chaleur entre phase pour la particule ' k ';
- Q_i^0 est la chaleur de formation de l'espèce ' i ';
- Q_g flux de chaleur;
- q_λ rapport de l'échelle de Taylor pour les fluctuations vitesse turbulente sur l'échelle de Taylor des fluctuations du scalaire;
- r est le rayon de la goutte;
- r_f est le rayon de la flamme;
- R ou R_0 est la constante des gaz parfaits;
- Re_g est le nombre de Reynolds de la goutte $Re_g = \frac{|u_\beta - v_\beta| r}{\nu}$;
- Re_t est le nombre de Reynolds turbulent $Re_t = \frac{u' l_t}{\nu}$;
- s ou S est l'indice indiquant une quantité propre à la surface du liquide;
- st est l'indice indiquant une quantité à la stochiométrie;
- Sc_i est le nombre de Schmidt, $Sc_i = \frac{\mu}{\rho D_i}$;
- 1. t est l'indice indiquant une quantité propre à la turbulence;
- 2. t indice désignant une variable totale (liquide +gaz);
- S_l vitesse de flamme laminaire;
- t_s temps de séjour moyen;
- T est la température;
- T_β est la traînée dans la direction β ;
- u indice pour une variable dans un milieu non brûlé;
- u_α est la vitesse dans la direction α ;
- u^{vap} est la vitesse de vaporisation;
- u' fluctuation de vitesse;
- U_S vitesse de la surface du liquide;
- $v_\beta^{(k)}$ est la vitesse des gouttes de la particule ' k ' dans la direction β ;
- v est l'indice indiquant une quantité propre à la vapeur de fuel;
- $We = \frac{\Delta u \rho d}{\sigma}$ est le nombre de weber;

- W_f taux de production par unité de volume de f ;
- W_{vap} taux de vaporisation;
- Y_i est la fraction massique de l'espèce i ;
- Y_S est la fraction massique de vapeur à la pression de vapeur saturante;
- Y_l est la fraction massique de liquide;
- Z est la variable de mélange;
- Z_i valeur de la variable de mélange initiale pour une particule fluide venant de s'évaporer;
- \widetilde{Z}^2 est la variance de la variable de mélange.

Lettres grecques :

- α stretch;
- δ rapport volumique de compression;
- $\delta_{\alpha,\beta}$ est le symbole de kronecker;
- δ_l épaisseur de flamme laminaire;
- δ_S fonction de Dirac caractéristique de la surface;
- 1. ε rapport volumique de compression;
- 2. $\varepsilon = \nu \frac{\partial u'_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial u'_\alpha}{\partial x_\beta}$ est la dissipation de la vitesse;
- $\varepsilon_Z = D \frac{\partial \widetilde{Z}'}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \widetilde{Z}'}{\partial x_\alpha}$ dissipation des fluctuations de Z ;
- 1. λ est le coefficient de diffusion thermique;
- 2. λ est l'échelle spatiale de Taylor;
- μ est la viscosité dynamique;
- ν est la viscosité cinématique;
- ν_i coefficient stochiométrique pour l'espèce i ;
- η_{th} rendement théorique;
- ω_{c_i} est le taux de réaction chimique de l'espèce i ;
- ω^{Jump} est le taux de réaction à l'endroit des sauts;
- ω_v est le taux de vaporisation;
- 1. ϕ richesse;
- 2. ϕ_s flux de chaleur servant à chauffer la goutte;
- ρ est la masse volumique;

- Σ est la quantité d'interface;
- σ est la tension de surface;
- τ échelle de temps;
- $\tau_a = \frac{r^2}{\nu} \frac{\rho_l}{\rho_g}$ échelle de temps d'adaptation pour une goutte;
- τ_c échelle de temps de la combustion;
- τ_t échelle de temps intégrale de la turbulence;
- τ_k échelle de temps de Kolmogorov de la turbulence;
- τ_Z temps de mélange du scalaire;
- τ_{vap} échelle de temps de la vaporisation;
- $\tau_{\alpha\beta}$ est le tenseur des contraintes visqueuses;
- Θ fraction volumique;
- χ est la dissipation scalaire.

Chapitre 9

Bibliographie

Bibliographie

- [1] S.K. Aggarwal and W.A. Sirignano. Unsteady spray flame propagation in a closed volume. *Combustion and Flames*, 62:69–84, 1985.
- [2] Fumiteru Akamatsu, Yukio Mitzutani, Masashi Katsuki, Shohji Tsushima, and Yong Dae Cho. Measurement of the local group combustion number of droplet clusters in a premixed spray stream. In *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, 1996.
- [3] A.A. Amsden, P.J. O'Rourke, and T.D. Butler. KIVA II: A computer program for chemically reactive flows with sprays. *Los Alamos National Laboratory report LA-11566-MS*, 1989.
- [4] K. Annamalai and W. Ryan. Interactive processes in gasification and combustion, part 1: Liquid drop arrays and clouds. *Progress in energy and combustion science*, 18:221–295, 1992.
- [5] F. Atzler. *Fundamental studies of aerosol combustion*. PhD thesis, University of Leeds, 1999.
- [6] Bertrand Barbeau. *Modélisation de la combustion diphasique en vue de la simulation d'un injecteur criotechnique*. PhD thesis, Ecole centrale Paris, 1998.
- [7] T.A. Baritaud, T.A. Heinze, and J.F. Le Coz. Spray and self-ignition visualization in a di diesel engine. *SAE Technical paper series*, (940681), March 1994.
- [8] M Barrere and R Prud'home. *Les équations fondamentales de l'aérothermochimie*. Masson et Cie, 1973.
- [9] M. Birouk, B. Chauveau, B. Sarh, A. Quilgars, and I. Gokalp. Turbulence effects on the vaporisation of monocomponent single droplets. *Combust. Sci. and Tech.*, 113-114:413–428, 1996.
- [10] R. Borghi and M. Destriau. *La combustion et les flammes*. Technip, 1995.
- [11] R. Borghi and M. Gonzalez. A lagrangian model for predicting turbulent diffusion flames with chemical kinetic effects. *Combustion and Flame*, 63:239–250, 1986.
- [12] Roland Borghi. Mise au point sur la structure des flammes turbulentes. *Journal de Chimie Physique*, 6:81, 1984.
- [13] Roland Borghi. Turbulent combustion modelling. *Progress in energy and combustion science*, 14:245–292, 1988.

- [14] Roland Borghi. The links between turbulent combustion and spray. In S.H. Chan, editor, *Transport phenomena in combustion*, volume 1, pages 1–18. Taylor and Francis, 1995.
- [15] D. Bradley, R.A. Hicks, M. Lawes, C.G.W. Sheppard, and R. Wooley. The measurement of laminar burning velocities and Markstein numbers for iso-octane-air and iso-octane-n-heptane-air mixtures at elevated temperatures and pressures in an explosion bomb. *Combustion and Flames*, 101:126–144, 1998.
- [16] D. Bradley, M. Lawes, and C.G.W. Sheppard. Study of turbulence and combustion interaction: Measurement and prediction of the rate of turbulent burning. Technical report, University of Leeds, 1994.
- [17] S.M. Candel, D. Veynante, F. Lacas, E. Maistret, N. Darabiha, and T. Poinso. Coherent flamelet model: Applications and recent extensions. *Recent Advances in combustion Modeling*, 1990.
- [18] A. Cessou. *Stabilisation de la combustion diphasique turbulente au-dessus d'un injecteur coaxial methanol/air*. PhD thesis, Université de Rouen, 1994.
- [19] P. Chassaing. *Mécanique des fluides. Eléments d'un premier parcours*. POLYTECH de l'I.N.P. de Toulouse, 1997.
- [20] G. Chen and A. Gomez. Co-flow laminar diffusion flame of monodispers sprays: Structure, evaporation and microgravity effects. *Combust. Sci. and Tech.*, 115:177–201, 1996.
- [21] H. Chen, S. Chen, and R.H. Kraichnan. *Phys. Rev. Lett.*, 63:2657, 1989.
- [22] R.K. Cheng and T.T. Ng. Velocity statistics inpremixed turbulent flames. *Combustion and Flame*, 52:185–202, 1983.
- [23] H.H. Chiu, H.Y. Kim, and E.J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. In *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 971–980, Pittsburgh, 1982. The Combustion Institute.
- [24] H.H. Chiu and T.M. Liu. Group combustion of liquid droplets. *Combust. Sci. and Tech.*, 17:127–142, 1977.
- [25] C. Clanet, G. Searby, and P. Clavin. Primary acoustic instability of flames propagating in tubes: case of spray and premixed gas combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, in preparation.
- [26] P. Clavin and J. Sun. Theory of acoustic instabilities of planar flames propagating in sprays or particle-laden gases. *Combust. Sci. and Tech.*, 78:265–288, 1991.
- [27] Paul Clavin. Dynamic behaviour of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. *Progress energy combustion science*, 11:1–59, 1985.
- [28] CNRS, editor. *Modélisation de la combustion*. Images des Mathématiques, 1996.

- [29] S.M. Correa and M. Sichel. The group combustion of a spherical cloud of monodisperse fuel droplets. In *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 981–991, Pittsburgh, 1982. The Combustion Institute.
- [30] F.X. Demoulin and F. Atzler. Numerical investigation of flame speed oscillations in spherical laminar aerosol flames. Technical Report T50, School of Mechanical Engineering, 1999.
- [31] B. Dillies, K. Marx, J. Dec, and C. Espey. Diesel engine combustion modeling using coherent flame model in Kiva II. *SAE Technical paper series*, (930074), 1993.
- [32] C. Dopazo. Recent developments in pdf methods. In *Turbulent reacting flows*, pages 375–374. Academic Press London, 1994.
- [33] J. Duclos, D. Veynante, and T. Poinso. A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95 (1/2):101–118, 1993.
- [34] P. Durand, M. Gorokhovski, and R. Borghi. The pdf-equation approach to diesel spray evaporation computations. *SAE Technical paper series*, (960632), February 1996.
- [35] P. Durand, M. Gorokhovski, and R. Borghi. An application of the probability density function model to Diesel engine combustion. *Combust. Sci. and Tech.*, accepted.
- [36] V. Eswaran and S.B. Pope. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar. *Phys. Fluids*, 31(3):506–520, 1988.
- [37] G.M. Faeth. Current status of droplet and liquid combustion. *Pro. Energy. Combust. Sci.*, 3:191–224, 1977.
- [38] R.O. Fox. Improved fokker-plank model for the joint scalar, scalar gradient pdf. *Phys. FLuids*, 1(6), 1994.
- [39] R.O. Fox. Computational method for turbulent reactive flows in the chemical process industry. Technical Report 9405, College of Engineering, Kansas State University, 1995.
- [40] Frossling. *Beitr. Geophys.*, 52:170–216, 1938.
- [41] F. Galzin. *Contribution à la modélisation de la combustion dans les moteurs à allumage commandé*. PhD thesis, Université de Rouen, 1996.
- [42] F. Galzin and Swan Desportes. Communication personnelle. 1999.
- [43] F. Gao. An analytical solution for the scalar probability density function in homogeneous turbulence. *Phys. Fluids A*, 3(4):511–513, 1990.
- [44] Jean-Loup Gauducheau. *Amélioration du fonctionnement d'un moteur alimenté au gaz naturel en mélange pauvre par ajout d'hydrogène*. PhD thesis, Université de Provence, 1997.
- [45] A. Gill, E. Gutheil, and J. Warnatz. Numerical investigation of the combustion process in a direct injection stratified charge engine. *Combust. Sci. and Tech.*, 115:317, 1995.

- [46] S.S. Girimaji. Assumed β -pdf model for turbulent mixing: Validation and extension to multiple scalar mixing. *Combust. Sci. and Tech.*, 78:177–196, 1991.
- [47] S.S. Girimaji. On the modeling of scalar diffusion in isotropic turbulence. *Phys. Fluids A*, 4(11):2529–2537, 1992.
- [48] G.A.E. Godsave. Studies of the combustion of drops in a fuel spray: The burning of single drops of fuel. In *Fourth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, 1953.
- [49] P.J. Goix, A. Cessou, D. Stepowski, and C.F. Edwards. Structure of a methanol/air coaxial reacting spray near the stabilization region by OH fluorescence imaging and two-component phase-doppler interferometry. In *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, pages 1107–1113. The Combustion Institute, 1992.
- [50] P.J. Goix, C.F. Edwards, A. Cessou, C.M. Dunskey, and Stepowski. Structure of a methanol/air coaxial reacting spray near the stabilization region. *Combustion and Flame*, 98:205–219, 1994.
- [51] M. Goldsmith and S.S. Penner. On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere. *Jet Propul.*, 24:245–251, 1954.
- [52] E. Gutheil and W.A. Sirignano. Counterflow spray combustion modeling including detailed transport and detailed chemistry. *Combustion and Flame*, 113(2):92, 1998.
- [53] C. Habchi, D. Verhoeven, C. Huynh Huu, L. Lambert, J.L. Vanhemelryck, and T. Baritaud. Modeling atomization and break up in high-pressure diesel sprays. *SAE Technical paper series*, (970881), February 1997.
- [54] M. Halstead, L. Kirsh, and C. Quinn. The autoignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures. fitting of a mathematical model. *Combustion and Flame*, 30:45, 1977.
- [55] H. Hanai, K. Maruta, Kobayashi H., and T. Niioka. Pulsating flame propagation of PMMA-particle-cloud in microgravity. In *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, 1998.
- [56] H. Hiroyasu, K. Nishida, H. Yoshida, and M. Arai. Ignition and flame propagation of spray compound mixture. *SAE Technical paper series*, (932711), October 1993.
- [57] C. Hollmann and E. Gutheil. Flamelet-modeling of turbulent spray diffusion flames based on a laminar spray flame library. *Combust. Sci. and Tech.*, 135:175–192, 1998.
- [58] A.R. Jones. *Instrumentation for flows with combustion*. Academic Press, 1993.
- [59] R.J. Kee, J.F. Grcar, M.D. Smooke, and J.A. Miller. Chemkin 2: A Fortran computer code package for the analysis of gas phase chemical kinetics. Technical Report SAND89-8009B, UC-706, SANDIA National Laboratories, 1989.
- [60] Alan R. Kerstein and Chung K. Law. Percolation in combustng sprays 1: Transition from cluster combustion to percolate combustion in non-premixed sprays. In *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 961–969, Pittsburgh, 1982. The Combustion Institute.

- [61] R.H. Kraichnan. *Phys. Rev. Lett.*, 65:575, 1990.
- [62] F. Lacas, N. Darabiha, P. Versaevel, J.C. Rolon, and S. Candel. Influence of droplet number density on the structure of strained laminar spray flames. In *Twenty-fourth Symposium (International) on Combustion*, pages 1523–1529, Pittsburgh, 1992. The Combustion Institute.
- [63] B.E. Launder and D.B. Spalding. *Mathematical models of turbulence*. Academic press, New-York, 1972.
- [64] C.K. Law. Recent advances in droplet vaporisation and combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 8:171–201, 1982.
- [65] M. Lawes. *Effects of turbulence on combustion in engines*. PhD thesis, University of Leeds, 1987.
- [66] B. Lecordier. *Etude de l'interaction de la propagation d'une flamme prémélangée avec le champ aérodynamique, par association de la tomographie rapide et de la vélocimétrie par images de particules*. PhD thesis, Université de Rouen, 1997.
- [67] G Lemasson. *Les machines transformatrices d'énergie*, volume 2. Librairie Delagrave, 1982.
- [68] N. Levy. *Etude numérique d'un jet Diesel Réactif*. PhD thesis, Ecole centrale de Lyon, 1997.
- [69] S. Loison. *Etude par modélisation numérique de la combustion de brouillards de gouttelettes*. PhD thesis, Université de Rouen, 1991.
- [70] T.S. Lundgren. Distribution functions in the statistical theory of turbulence. *Phys. Fluids*, 10(5):969–975, 1967.
- [71] B. Magnussen and B. Mjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion. In *16th Symposium (International) on Combustion*, pages 719–727, Pittsburgh, 1976. The Combustion Institute.
- [72] T. Mantel and R. Borghi. A new model of premixed wrinkled flame based on a scalar dissipation equation. *Combustion and Flames*, 96:443–457, 1994.
- [73] F.E. Marble and J.E. Broadwell. The coherent flame model for turbulent chemical reactions. *Project Squid Report*, (TRW-9-PU), 1977.
- [74] C. Meneveau and T. Poinso. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 86:311–332, 1991.
- [75] J.A. Miller, R.J. Kee, and C.K. Westbrook. Chemical kinetics and combustion modeling. *Annual review in physical chemistry*, 41:345–387, 1990.
- [76] K. Miyasaka and C.K. Law. Combustion of strongly-interacting linear droplet arrays. In *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, 1981.
- [77] H.J. Moon. *Modèles de combustion turbulente appliqués à l'autoinflammation. Comparaison avec la simulation directe*. PhD thesis, Université de Rouen, 1991.

- [78] H.J. Moon, E. Bidaux, and R. Borghi. Micromixing characteristic time and closure models for premixed turbulent combustion at moderate Damköhler numbers. *Combust. Sci. and Tech.*, 130:49–78, 1997.
- [79] Mitsubishi Motors. Gasoline direct injection engine. <http://web1.mitsubishi-motors.co.jp/inter/technology>.
- [80] M.P. Musculus and Rutland C.J. Coherent flamelet modeling of diesel engine combustion. *Combust. Sci. and Tech.*, 104:295, 1995.
- [81] E.E. O'Brien. The probability density function(pdf) approach to reacting turbulent flows. *Turbulent reacting flows*, page 185, 1980.
- [82] P.J. O'Rourke. Oral presentation. In *Twenty-third direct injected stratified charge working group meeting*. Los Alamos National Laboratory, 1983.
- [83] P.J. O'Rourke and A.A. Amsden. Three dimensional numerical simulations of the UPS-292 stratified charge engine. *SAE Technical paper series*, (870597), 1987.
- [84] M. Oubounou. *Modélisation de la combustion turbulente non prémélangée avec prise en compte d'une cinétique complexe*. PhD thesis, Université de Rouen, 1994.
- [85] M. Oubounou, M. Gonzalez, and R. Borghi. A Lagrangian model for predicting turbulent diffusion flames with chemical kinetic effects. In *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion*, pages 1107–1113. The Combustion Institute, 1994.
- [86] M. Pilch and C.A. Erdman. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of liquid drop. *Int. J. Multiphase flow*, 13(6):741–757, 1987.
- [87] A. Pires da Cruz, T. Baritaud, and T. Poinso. Turbulent self-ignition and combustion modeling in diesel engines. *SAE Technical paper series*, (1999-01-1176), March 1999.
- [88] S. Pope. The evolution of surfaces in turbulence. *Int. J. Eng. Sci.*, 26(5), 1988.
- [89] S.B. Pope. The statistical theory of turbulent flames. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, A291:529–568, 1979.
- [90] S.B. Pope and M.S. Anand. Flamelet and distributed combustion in premixed turbulent flames. In *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, pages 403–410. The Combustion Institute, 1984.
- [91] R.D. Reitz. Modeling atomisation processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomization and Spray Technology*, 3:309–337, 1987.
- [92] R. Said and R. Borghi. In *Eigteenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, 1981.
- [93] Laurent Schwartz. *Méthodes mathématiques pour les sciences physiques*. Herman, 1965.
- [94] Laurent Schwartz. *Théorie des distributions*. Herman, 1966.

- [95] M.J. Scott. *Distributions of strain rate and temperature in turbulent combustion*. PhD thesis, Dept. of Mech. Eng., The University of Leeds, 1992.
- [96] D. Spalding. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. In *13th Symposium (International) on Combustion*, pages 649–657, Pittsburgh, 1971. The Combustion Institute.
- [97] D.B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *Fourth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, 1953.
- [98] A.M.K.P. Taylor. *Optically-based measurement techniques for dispersed two phase flow*. Kluwer academic publishers, 1992.
- [99] A. Trouvé and T. Poinso. The evolution equation for the flame surface density. *J. Fluid Mech.*, 278:1–31, 1994.
- [100] A. Vallet and R. Borghi. Modélisation Eulérienne de l'atomisation. In *Actes du 13ème Congrès français de mécanique*, volume 3, page 115, 1997.
- [101] E. Van Kalmthout, D. Veynante, and S. Candel. Direct numerical simulation analysis of flame surface density in non-premixed turbulent combustion. In *26th Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, 1971.
- [102] D. Verhoeven, J.L. Vanhemelryck, and T. Baritaud. Macroscopic and ignition characteristics of high-pressure sprays of single-component fuels. *SAE Technical paper series*, (981069), February 1998.
- [103] L. Vervisch, E. Bidaux, K. Bray, and W. Kollmann. Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density and flame surface approach. *Phys. Fluids A*, 7(10), 1995.
- [104] L. Vervisch and D. Veynante. Combustion turbulente. In *Sixième école de combustion*,, Oléron, 1998. Ecole thématique du CNRS.
- [105] D. Veynante, F. Lacas, and S.M. Candel. A new flamelet combustion model combining premixed and non-premixed turbulent flames. *AIAA*, 0487, 1989.
- [106] J. Villermaux. Micromixing phenomena in stirred reactors. pages 707–768, West Orange, 1986.
- [107] Charles K. Westbrook and Frederick L. Dryer. A comprehensive mechanism for methanol oxidation. *Combust. Sci. and Tech.*, 20:125–140, 1979.
- [108] Charles K. Westbrook and Frederick L. Dryer. Prediction of laminar flame properties of methanol-air mixtures. *Combustion and Flame*, 37:171–192, 1980.
- [109] Charles K. Westbrook and Frederick L. Dryer. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. and Tech.*, 27:31–43, 1981.
- [110] C.K. Westbrook and F.L. Dryer. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion. *Progress energy combustion science*, 10:1–57, 1984.

- [111] C.T.R. Wilson. On a method of making visible the paths of ionising particles through a gas. *Proc.Roy.Soc*, A85:285–288, 1911.
- [112] J. Xin, L. Ricart, and R.D. Reitz. Computer modeling of diesel spray atomization and combustion. *Combust. Sci. and Tech.*, 137:171–194, 1998.
- [113] T.Y. Xiong, C.K. Law, and K. Miyasaka. Interactive vaporization and combustion of binary droplet systems. 1987.

Table des matières

1	Remerciements	3
2	Introduction	5
3	Position du problème	7
3.1	La combustion dans les moteurs	7
3.1.1	Aperçu des moteurs à explosion et de leurs futurs développements	7
3.1.2	Chambres de combustion du moteur diesel	9
3.1.3	Chambre de combustion du moteur essence à injection directe	15
3.2	Description de la combustion des brouillards de gouttes combustibles	19
3.2.1	Structure des différents types de flammes	19
3.2.2	Flamme de brouillard prémélangé	20
3.2.3	Flamme de brouillard de diffusion	25
3.2.4	Observation expérimentale de quelques flammes diphasiques	26
4	Equations pour des milieux diphasiques réactifs	51
4.1	Description instantanée	51
4.1.1	Equations de base pour un fluide réactif monophasique	51
4.1.2	Généralisation des équations locales pour les milieux homogènes aux milieux à deux phases liquide et gaz	57
4.1.3	Le taux de vaporisation	61
4.1.4	La variable de mélange Z	62
4.2	Description statistique moyenne d'un milieu turbulent diphasique	65
4.2.1	Utilisation des équations locales dans le cas d'un spray turbulent	65
4.2.2	Les équations moyennes pour la phase gazeuse	67
4.3	Annexe	71
4.3.1	Annexe pour le calcul de l'équation de l'énergie cinétique turbulente k	72
5	Modélisation	75
5.1	Les termes de flux moyen à travers l'interface liquide - gaz	75
5.1.1	Termes d'échanges entre phases pour une goutte seule dans un écoulement simple	75
5.1.2	Les interactions moyennes du spray avec la phase gazeuse	80
5.2	Modélisation du terme de réaction chimique	84
5.2.1	Position du problème	84
5.2.2	Combustion turbulente en phase purement gazeuse	85
5.2.3	Combustion turbulente en milieu diphasique	91

5.3	Estimation de la PDF de Z	94
5.3.1	Equation de transport pour la PDF de Z	94
5.3.2	Méthode approchée pour calculer la PDF de Z	96
5.3.3	Z_i , la limite supérieure de domaine de Z	98
5.3.4	Equation de transport pour \widetilde{Z}^{i2}	99
5.3.5	Forme approchée de la PDF	102
5.4	Calcul du taux de réaction moyen à partir de $P(Z)$	107
5.4.1	Chimie infiniment plus rapide que le mélange	107
5.4.2	Chimie infiniment brusque, à haute énergie d'activation globale	112
5.5	Annexe	120
5.5.1	Annexe: calcul de l'équation de transport de \widetilde{Z}^{i2} à partir de l'équation exacte pour Z	121
5.5.2	Annexe: Calcul de l'équation de transport de \widetilde{Z}^{i2} à partir de l'équation de la PDF de Z	123
5.5.3	Les termes d'évaporation	124
5.5.4	Vérification dans un cas limite de la validité des termes dus à l'évaporation dans l'équation de \widetilde{Z}^{i2}	125
5.5.5	Annexe pour déterminer $P(Z)$ en fonction de $P(t)$ la probabilité de temps de séjour	127
6	Implémentation et résultats	129
6.1	Implémentation de la méthode	129
6.1.1	Le code existant	129
6.1.2	Le principe de l'amélioration de KIVAGSM	130
6.2	Cas d'une flamme jet diphasique turbulente de méthanol	131
6.2.1	Description de l'expérience	131
6.2.2	Condition de la simulation numérique	133
6.2.3	Résultats	138
6.3	Auto-inflammation d'un spray de type Diesel	148
6.3.1	Description de l'expérience	148
6.3.2	Simulation	149
6.3.3	Résultats	150
6.3.4	Discussions	152
7	Conclusion et Perspectives	163
8	Nomenclature	167
9	Bibliographie	173
10	Résumés	185

Chapitre 10

Résumés

Résumé

Le sujet de cette thèse est la modélisation de la combustion turbulente en milieu diphasique telle qu'elle a lieu par exemple dans les moteurs Diesel. Certaines expériences notamment celles présentées dans cette thèse suggèrent que quand le combustible nécessaire à la combustion est sous forme d'un nuage de gouttes, les fluctuations en particulier de richesse dans le milieu gazeux sont plus fortes. Cela doit être pris en compte dans la modélisation et pourrait être dû à la présence des gouttes. Celles-ci en s'évaporant, jouent le rôle de sources de combustible ponctuelles, aléatoirement réparties dans l'espace, ce qui crée plus de fluctuations à l'échelle de l'espace intergoutte. Ces fluctuations supplémentaires sont prises en compte ici par un groupe de termes lié à l'évaporation, dans l'équation de la variance de la variable de mélange, qui sont fermés en considérant les équations locales d'un milieu diphasique. L'importance d'une nouvelle variable décrivant l'état du mélange à la surface des gouttes au moment de l'évaporation d'une particule fluide a été montrée. Une équation fermée a été écrite pour cette variable. Ces deux nouvelles caractéristiques permettent de mieux décrire l'état du mélange.

Pour représenter la combustion nous avons d'abord utilisé un modèle qui suppose que la chimie est infiniment rapide. L'état du milieu thermo-chimique est alors complètement dépendant de l'évaporation et du mélange sans influence de la cinétique chimique. Le modèle MIL de Gonzalez et Borghi est ensuite utilisé pour prendre en compte certains effets chimiques. Il suppose que la chimie est infiniment brusque, c'est-à-dire à température d'activation très élevée. Ces deux modèles ont été testés pour deux configurations expérimentales, une flamme de type jet et une bombe simulant la combustion dans les moteurs Diesel. Les taux de fluctuation trouvés lors de ces simulations sont assez élevés et mettent en avant la nécessité de bien estimer la dissipation des fluctuations scalaires. Les résultats trouvés en utilisant ces modèles sont comparables à ceux mesurés, notamment dans le cas de la bombe de type Diesel, le modèle MIL permet de retrouver un temps d'auto-allumage et une longueur de la flamme réaliste.

Abstract

This thesis deals with the modelling of the turbulent combustion in two-phase flow that occurs in Diesel engine. Some experiments, especially those presented in this thesis, suggest that when the fuel needed for the combustion is injected in a liquid form, the fluctuation of the equivalence ratio in gas phase, are enhanced. This phenomenon must be taken into account

to represent the mixing process and could be due to the presence of fuel droplets. During their vaporisation, the droplets play the role of local source terms randomly distributed in space, which create fluctuation with a characteristic length scale equal to the mean space between the droplets. These added fluctuations are taken into account by introducing a set of terms due to the vaporisation, in the equation for the root mean square of the mixing variable. Considering the local equation of a two-phase flow medium closes these terms. We have shown the importance of a new variable, which describes the state of mixing at the liquid surface when a new fluid particle is evaporated. A closed equation was written for this variable. Both these new characteristics permit to describe the mixing more accurately.

In order to describe the combustion, our first attempt was to use a model based on the assumption of an infinitely fast chemistry. Thus the chemical state of the medium depends only on the vaporisation and of the mixing with out any influence of the chemistry. After that, the MIL model of Gonzalez and Borghi is used to take into account some effects due to the finite chemical rate, by assuming that the chemistry is infinitely sudden. Both models were tested in two different experimental configurations: the first one is a jet flame and the second one is a bomb simulating a Diesel combustion room. The levels of fluctuations found in the numerical simulations are quite high and emphasise the importance estimating accurately the scalar dissipation. The results computed with these models are in agreement with the experiments, especially for the Diesel bomb, the Mil model permits to estimate realistically the auto ignition time and the flame length.